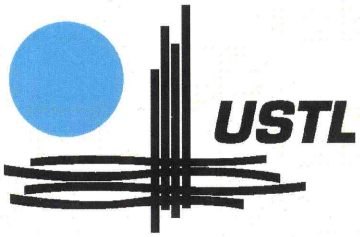
Numéro d'ordre: 4220



THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES DE LILLE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE LILLE 1

OPTIQUE ET LASERS – PHYSICO-CHIMIE – ATMOSPHÈRE

par

Pascal DIÉVART

OXYDATION ET COMBUSTION EN MILIEU ULTRA-PAUVRE DE CARBURANTS TYPES GAZOLES. ÉTUDE EXPÉRIMENTALE EN RÉACTEUR AGITÉ ET MODÉLISATION.

Soutenue le 14 octobre 2008 devant le jury composé de:

J. VANDOOREN	Rapporteur	Professeur à l'Université Catholique de Louvain
R. FOURNET	Rapporteur	Professeur à l'ENSIC-INPL-Nancy
J.-F. PAUWELS	Président	Professeur à l'Université des Sciences et Technologies de Lille
B. DESMET	Examinateur	Professeur à l'Université de Valenciennes et du Haut Cambrésis
N. CHAUMEIX	Examinatrice	Chargée de recherche HDR au CNRS-ICARE
P. DAGAUT	Co-directeur de thèse	Directeur de recherche au CNRS-ICARE
R. MINETTI	Directeur de thèse	Professeur à l'Université d'Artois

© 2009 Tous droits réservés.

http://doc.univ-lille1.fr

AVANT-PROPOS

Je remercie l'ADEME (Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Energie) et la Région Nord-Pas-de-Calais pour l'attribution d'une allocation de recherche durant ces 3 années. Je remercie également les sociétés Total, PSA Peugeot-Citroën et le CNRS qui ont tous trois financé ces travaux.

Je suis extrêmement reconnaissant à MM. J. Vandooren et R. Fournet d'avoir accepté et m'avoir fait l'honneur de rapporter ce travail. Que les autres membres du jury soient également remerciés.

J'exprime ma reconnaissance à M. P. Dagaut qui m'a encadré durant ces 3 ans et m'a permis de mener à bien ces travaux. Ses conseils et son expérience ont été salutaires en de très nombreuses occasions. Je souhaite également remercier M. R. Minetti, directeur de thèse, pour m'avoir fait confiance et proposé ce sujet de thèse alors que mes connaissances en chimie de la combustion étaient quasi-inexistantes.

Un grand merci également à toutes les personnes qui ont participé à ce projet de recherche et ses différentes réunions, et notamment les différents doctorants: Moïse Crochet, Emir Pousse et Thomas Dubois.

Je remercie également le personnel administratif: V. Pineau, E. Jallot, M. Chevrier, R. Herbin, J. Clinard, M. Donnadieu. Merci également à MM. I. Gökalp et J.-F. Pauwels, respectivement directeur de ICARE et du PC2A.

Un grand merci également à G. Dayma et S. Gail avec lesquels j'ai successivement partagé le bureau C100. Ils m'ont initié aux expériences en réacteur auto-agité, aux dispositifs de mesure ainsi qu'aux travaux de modélisation.

Je remercie également les membres de l'équipe OH: T. LeCong, A. Andrade, C. Togbé, K. Hadjali, A. Mze Ahmed, D. Alseda et A. Piperel.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Merci aussi à tous ceux que j'ai rencontrés durant ces 3 ans: Mayuresh, Thomas, Fabien, Angélique, Homan, Mohammed, Ludovic, Ludivine, Pablo, Mai Lan, Rémy, François, Alexis, Fabien, Cem, Baris, Evgeniy, Thomas, Mohammed, Sandra, Laure, Joël et ceux que malheureusement j'oublie. Merci pour leur sympathie.

Je remercie également Gilles, Christophe, Benjamin, Jackie, Sébastien, Grégory et tous les autres membres du St-Marceau TT qui ont su me faire oublier quelques heures par semaine le monde de la recherche.

Enfin je finirai en remerciant tous les membres de ma famille: mes parents, mes frères, mon grand-père, mes oncles, tantes et cousins. Ils m'ont toujours soutenu et cru en moi.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

SOMMAIRE

Introduction 11

Chapitre 1: Contexte de l'étude 15

1. Le réchauffement climatique et les gaz à effet de serre 17

1.1 Effet de serre 17

1.2 Effet de serre anthropique 20

1.3 Mesures de lutte contre les émissions de gaz à effet de serre 21

1.4 Cas du transport routier 23

2. La pollution automobile 25

2.1 Principaux polluants automobiles 25

a) Polluants communs 25

b) Polluants spécifiques 26

2.2 Une réglementation de plus en plus contraignante 27

3 Vers une évolution du couple carburant-moteur 29

3.1 Un problème, des solutions...à long terme 29

3.2 Des évolutions à court-terme 30

a) Les biocarburants et agrocarburants 30

b) De nouvelles technologies moteur 30

4 Le moteur HCCI 32

4.1 Principe de fonctionnement 32

4.2 Limites et contraintes 33

5. Le gazole 34

5.1 Origine et caractéristiques 34

5.2 Un produit réglementé 34

5.3 Composition chimique d'un gazole. 35

Conclusion 37

Références bibliographiques 39

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Chapitre 2: Étude bibliographique 41

Introduction 43

1. Études de composés purs 45

1.1 Oxydation des alcanes 45

a) basse température 45

b) coefficient négatif de température 47

c) mécanisme de haute température 48

1.2 Oxydation du n-décane 48

1.3 Oxydation des naphtènes 53

a) cyclohexane 54

b) alkylcyclohexanes 57

1.4 Oxydation des hydrocarbures aromatiques 58

a) oxydation du benzène 60

b) oxydation du toluène 63

c) oxydation des alkylbenzènes supérieurs 65

2. Études de mélanges 69

2.1 Mélanges d'alcanes 70

2.2 Mélanges alcane/alcène 70

2.3 Mélanges alcane/alcène/aromatique 71

3. Modélisation cinétique 75

3.1 Modélisation de l'oxydation du n-décane 76

3.2 Modélisation de l'oxydation des naphtènes 78

3.3 Modélisation de l'oxydation des aromatiques 80

Conclusion 83

Références bibliographiques 85

Chapitre 3: Dispositif expérimental 99

Introduction 101

1. Le réacteur auto-agité par jets gazeux 103

1.1 Principe des réacteurs parfaitement agités 103

1.2 Description du réacteur auto-agité 103

a) le réacteur 104

b) introduction des réactifs 105

c) prélèvement et échantillonnage 106

2. Calcul des débits 106

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

3. Analyse des gaz **107**
3.1 Analyse des composés hydrocarbonés 108
3.2 Analyse de l'hydrogène 108
3.3 Analyse des espèces O_2, CO, CO_2, CH_2O 108
3.4 Analyse des produits lourds 110
3.5 Analyse qualitative: spectrométrie de masse 110
4. Incertitudes **111**
Conclusion **113**
Références bibliographiques **115**

Chapitre 4: Étude expérimentale en Réacteur auto-agité **117**

Introduction **119**
1. Résultats expérimentaux **121**
1.1 Oxydation du n-décane 121
a) conditions expérimentales *121*
b) résultats expérimentaux *122*
1.2 Oxydation du n-propylcyclohexane 125
a) conditions expérimentales *125*
b) résultats expérimentaux *126*
1.3 Oxydation du n-butylbenzène 129
a) conditions expérimentales *129*
b) résultats expérimentaux *129*
1.4 Oxydation du mélange n-décane/n-propylcyclohexane 135
a) conditions expérimentales *135*
b) résultats expérimentaux *135*
1.5 Oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène 141
a) conditions expérimentales *141*
b) résultats expérimentaux *141*
1.6 Oxydation du mélange n-décane/n-propylcyclohexane/n-butylbenzène 147
a) conditions expérimentales *147*
b) résultats expérimentaux *147*
2. Interactions au sein des mélanges **152**
2.1 Détermination de la vitesse de réaction d'un composé 152
2.2 Comparaison des vitesses d'oxydation - Influence des partenaires 153
a) influence de la richesse *153*
b) influence des partenaires d'oxydation *155*
3. Formation des polluants **158**

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

3.1 Benzène 159
3.2 Buta-1,3-diène 160
3.3 Formaldéhyde 160
3.4 Acétaldéhyde 161
3.5 Méthane 162

Conclusion 165

Références bibliographiques 167

Chapitre 5: Développement et validation d'un modèle cinétique 169

Introduction 171

1. Sous-mécanisme C_0-C_4 173

1.1 Base C_0-C_2 173
1.2 Sous-mécanisme C_3-C_4 175
1.3 Dépendance en pression 177
1.4 Influence des modifications apportées 177

2. Le sous-mécanisme d'oxydation du n-décane 178

2.1 Origine du sous-mécanisme initial 178
2.2 Modifications effectuées 179
a) distinction des isomères 180
b) modifications des voies réactionnelles 181
c) réévaluation des constantes de vitesse 183
2.3 Simulations en réacteur auto-agité 186
a) confrontation modèle-expérience 186
b) analyse de voies réactionnelles 191
c) analyse de sensibilité 195
d) validation supplémentaire en réacteur auto-agité 197
2.4 Modélisation en réacteur à écoulement 199
2.5 Simulations en tube à choc 201

3 Le sous-mécanisme d'oxydation du n-propylcyclohexane 203

3.1 Mécanisme de haute température 204
3.2 Mécanisme de basse température 205
a) schéma cinétique 205
b) paramètres cinétiques 206
3.3 Confrontation modèle-expérience en réacteur auto-agité 210
a) oxydation du cyclohexane 210
b) oxydation du n-propylcyclohexane 211
c) analyse de voies réactionnelles 216

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

d) analyse de sensibilité 221

4 Le sous-mécanisme d'oxydation du n-butylbenzène 223

4.1 Le mécanisme de Ribaucour *et al* 223

4.2 Construction du sous-mécanisme d'oxydation du n-butylbenzène 224

a) base aromatique benzène-propylbenzène 224

b) sous-mécanisme de basse température 225

c) sous-mécanisme de haute température 227

4.3 Simulations en réacteur auto-agité 229

a) oxydation du benzène, toluène et propylbenzène 229

b) oxydation du butylbenzène 233

c) analyse de voies réactionnelles 238

d) analyse de sensibilité 241

4.4 Simulation en réacteur à écoulement 243

5. Oxydation des mélanges binaires et ternaire 244

5.1 Élaboration du mécanisme global-Réactions d'interaction 244

5.2 Oxydation du mélange n-décane/n-propylcyclohexane 60/40 (mole/mole) 245

a) confrontation modèle-expérience 245

b) analyse de voies réactionnelles 250

c) analyse de sensibilité 250

5.3 Oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène 60/40 (mole/mole) 251

a) confrontation modèle-expérience 251

b) analyse de voies réactionnelles 252

c) analyse de sensibilité 252

5.4 Oxydation du mélange ternaire 258

a) confrontation modèle-expérience 258

b) analyse de voies réactionnelles 258

c) analyse de sensibilité 263

Conclusion 265

Références bibliographiques 267

Conclusion 275

Annexes 283

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

© 2009 Tous droits réservés.

http://doc.univ-lille1.fr

INTRODUCTION

Dès l'Antiquité (civilisations mésopotamiennes, 6000 av J-C) le pétrole (du latin *petra oleum*: huile de roche) a été utilisé pour diverses applications dont l'éclairage (lampes à huile), le maquillage,... Mais l'utilisation de cette ressource est restée marginale (due aux faibles ressources que représentaient les affleurements naturels) jusqu'au milieu du 19ème siècle. C'est à cette époque (1853) que furent forés en Pennsylvanie (États-Unis) les premiers puits de pétrole. Dès lors, et au fil de la multiplication de ses possibles utilisations, va se créer une industrie qui assurera la fortune et le passage à la postérité de nombreux hommes tels que John D. Rockefeller (1839-1937) ou Ludvig Nobel (1831-1888).

Très rapidement cet “or noir” va devenir un pilier de l'économie mondiale (en 2007, 5 des 10 plus grosses sociétés privées de la planète étaient des industries pétrolières) et la demande en pétrole va alors augmenter, entraînant une évolution exponentielle de la production entre 1900 et 1950. Nos sociétés sont aujourd'hui devenues fortement, si ce n'est totalement, dépendantes de cette source d'énergie, dépendance qui peut être à l'origine de tensions aussi bien économiques que stratégiques.

Parmi les multiples applications et utilisations du pétrole, la fabrication des carburants à destination du transport terrestre est, et de loin, le principal débouché. Le secteur routier, et donc l'industrie automobile, s'avèrent donc être indissociables de l'industrie pétrolière.

Cependant après des périodes fastes où personne ne se préoccupait des questions autres que celles liées à son extraction, le pétrole est aujourd'hui source de nombreuses préoccupations. La demande et la consommation ne cessent de croître, et même si de nouvelles nappes pétrolières sont régulièrement découvertes, les réserves mondiales ne seront pas inépuisables et les estimations prévoient l'extraction des dernières gouttes de pétrole vers le milieu de ce siècle. L'après-pétrole se révèle donc être un sujet épineux, et inquiétant pour les économistes, dont il faut dès aujourd'hui se préoccuper. De plus, la combustion des combustibles fossiles, et donc du pétrole dans notre cas, n'est pas innocente et seulement source de bienfaits. Elle est en effet source de larges émissions de

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

gaz à effet de serre et de composés polluants et parfois toxiques aux conséquences, directes ou indirectes, néfastes sur la santé humaine.

Le secteur automobile a depuis de nombreuses années pris conscience de ces problèmes et a travaillé à l'évolution des technologies moteur afin de les rendre plus sobres et plus propres, parfois sous la contrainte de la législation. Ces évolutions techniques ont nécessité de nombreux travaux de recherche sur la compréhension des mécanismes d'oxydation des hydrocarbures. Les premières études n'avaient qu'un caractère expérimental, mais le développement des outils informatiques couplé à la puissance de calcul croissante des ordinateurs a permis de compléter ces études expérimentales par des travaux de modélisation. Ainsi au niveau de la cinétique chimique, ces modèles ont permis de mieux comprendre les mécanismes réactionnels menant aux principales espèces chimiques polluantes et de travailler à la réduction de leurs émissions. Cependant les carburants commerciaux, mélanges complexes de molécules hydrocarbonées, ont très longtemps été représentés dans ces études par un seul hydrocarbure ou par un mélange binaire de 2 composés simples appartenant à la famille des paraffines (cas emblématique du mélange heptane/isooctane pour les essences), ce qui laissait de côté l'influence que pouvait avoir les autres familles d'hydrocarbures comme les cyclanes ou les aromatiques.

Cependant, alors que jusqu'à présent la cinétique chimique était le parent pauvre du développement des technologies automobiles, elle prend aujourd'hui de l'importance avec l'apparition et le développement de nouveaux modes de combustion pour lesquels elle joue un rôle primordial. Ainsi dans le cas de la combustion HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition), qui présente l'avantage de limiter la formation des oxydes d'azote et des particules, deux des principaux polluants réglementés, l'inflammation du mélange air-carburant durant le cycle moteur est gouvernée par la cinétique chimique (alors qu 'elle est asservie à l'allumage de la bougie ou à l'injection du carburant pour les moteurs à explosion et Diesel respectivement). Il est donc essentiel de bien connaître celle-ci, notamment aux plus basses températures. Le développement de moteurs basés sur ce mode de combustion nécessite donc l'étude de l'oxydation des carburants commerciaux, ou du moins de mélanges modèles d'hydrocarbures permettant de représenter ces carburants (“surrogate fuels”). Ceci permettra dans un premier temps de comprendre les voies et réactions mises en jeu lors de ce processus et par la suite de prédire comment celle-ci se déroulera selon les conditions thermodynamiques dans le moteur à l'aide d'un modèle validé grâce à des résultats expérimentaux fiables obtenus dans des réacteurs idéaux.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Nous avons dans ce travail de thèse tenté de comprendre les voies chimiques mises en jeu lors de l'oxydation de basse et haute température de 3 hydrocarbures modèles: le n-décane, le n-propylcyclohexane et le n-butylbenzène. Ces 3 composés, appartenant chacun à une des 3 grandes familles constitutives des carburants (paraffines, naphtènes et aromatiques), ont été étudiés en réacteur auto-agité par jets gazeux à haute pression. Sur la base de ces travaux, des mécanismes cinétiques ont été développés pour chacune de ces 3 molécules. Par la suite nous avons entrepris la même démarche pour les 2 mélanges binaires à base de décane et le mélange ternaire choisi pour représenter un gazole commercial.

Cette étude s'inscrit dans un programme plus global, Pôle National à Implémentation Régionale « Combustion Alternative Maîtrisée » (PNIR CAM1), associant le CNRS, l'ADEME et les sociétés Total et PSA Peugeot-Citroën. Trois laboratoires sont impliqués dans le même projet de recherche et ont chacun étudié l'oxydation des 3 composés sus-cités dans les dispositifs expérimentaux en leur possession: en Machine à Compression Rapide au laboratoire de Physico-Chimie des Processus de Combustion et de l'Atmosphère (UMR 8522, Villeneuve d'Ascq), sur brûleur à flamme plate au Département de Chimie Physique des Réactions (UMR 7630, Nancy) et à l'Institut de Combustion, Aérothermique, Réactivité et Environnement (UPR 3021, Orléans) en Tube à Choc et Réacteur auto-agité. Les résultats présentés ici sont donc complémentaires de ceux issus des autres travaux du projet, fournissant ainsi une vue d'ensemble et détaillée (en température et pression) de l'oxydation de ces hydrocarbures.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

© 2009 Tous droits réservés.

http://doc.univ-lille1.fr

CHAPITRE I : CONTEXTE DE L'ÉTUDE

1. Le réchauffement climatique et les gaz à effet de serre 17
1.1 Effet de serre 17
1.2 Effet de serre anthropique 20
1.3 Mesures de lutte contre les émissions de gaz à effet de serre 21
1.4 Cas du transport routier 23
2. La pollution automobile 25
2.1 Principaux polluants automobiles 25
a) Polluants communs 25
b) Polluants spécifiques 26
2.2 Une réglementation de plus en plus contraignante 27
3 Vers une évolution du couple carburant-moteur 29
3.1 Un problème, des solutions...à long terme 29
3.2 Des évolutions à court-terme 30
a) Les biocarburants et agrocarburants 30
b) De nouvelles technologies moteur 30
4 Le moteur HCCI 32
4.1 Principe de fonctionnement 32
4.2 Limites et contraintes 33
5. Le gazole 34
5.1 Origine et caractéristiques 34
5.2 Un produit réglementé 34
5.3 Composition chimique d'un gazole. 35
Conclusion 37
Références bibliographiques 39

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

© 2009 Tous droits réservés.

http://doc.univ-lille1.fr

1. Le réchauffement climatique et les gaz à effet de serre

Depuis maintenant plusieurs années on a constaté une hausse, certes légère, de la température moyenne sur Terre. Cette hausse est accompagnée d'une augmentation de la fréquence des évènements climatiques extrêmes (sécheresse, cyclones et typhons,...) dont la violence croît également, et d'une diminution des glaces polaires. Ces phénomènes, aux conséquences humaines et économiques fâcheuses, ont pour origine une hausse de l'effet de serre, et plus particulièrement l'effet de serre additionnel dû aux activités humaines.

1.1 Effet de serre

L'effet de serre (Figure I.1) est un phénomène naturel et essentiel au maintien de la vie sur Terre. En effet, sans lui la température superficielle moyenne du globe serait proche de -18° C alors qu'elle est en réalité située aux alentours de +15° C.

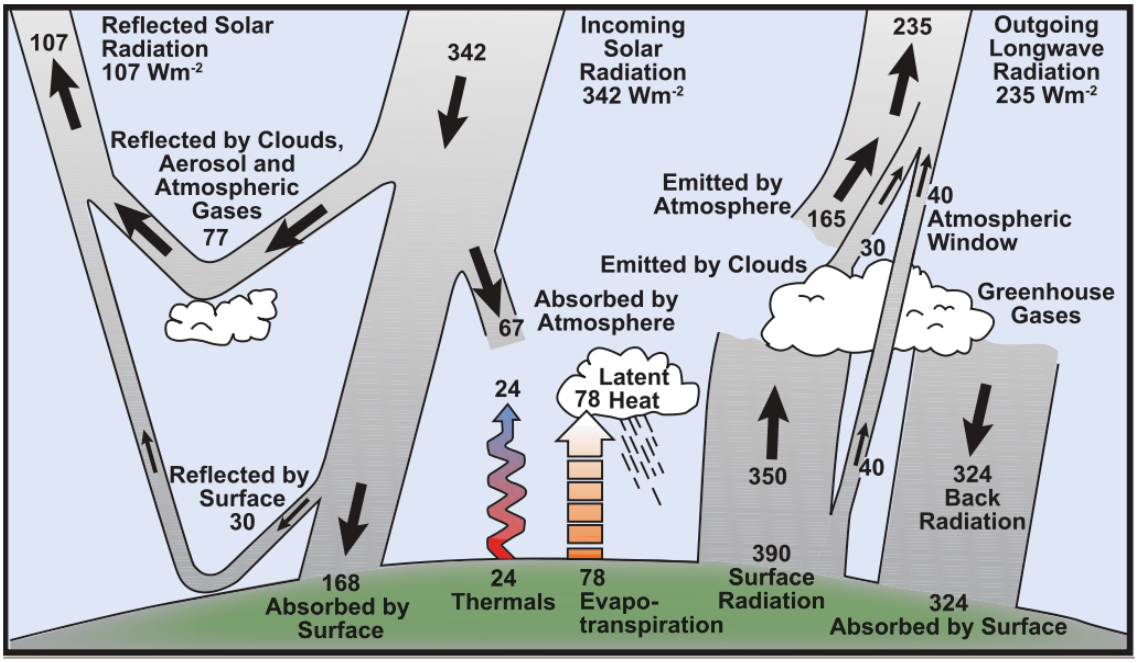


Figure I.1: Bilan radiatif annuel et global de la Terre (GIEC 2007 [1])

Parmi le rayonnement solaire incident, seule une partie (50%) atteint la surface terrestre. Ce rayonnement, au niveau de la surface, est alors soit réfléchi soit absorbé selon les propriétés locales du sol (le rapport de l'énergie lumineuse réfléchie par une surface sur l'énergie lumineuse incidente, albedo, est compris entre 0 (corps noir) et 1 (miroir parfait); il est en moyenne égal à 0,39 à la surface de la Terre). L'énergie absorbée par le sol va ensuite être réémise sous forme de rayonnement infrarouge (rayonnement de type corps noir, Loi de Wien: λ_{max}(15°C)=10060nm) qui

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

va pouvoir être absorbé par certaines molécules présentes dans l'atmosphère. Cette énergie va alors rester piégée dans les basses couches de l'atmosphère, et va engendrer une augmentation de la température moyenne lorsque ces molécules vont se débarrasser de cette énergie excédentaire.

composé	CO_2	CH_4	N_2O	SF_6
PGR	1	25	298	22800

Tableau I.1: Pouvoir de réchauffement global (PGR) des principaux gaz à effet de serre (GIEC 2007 [1])

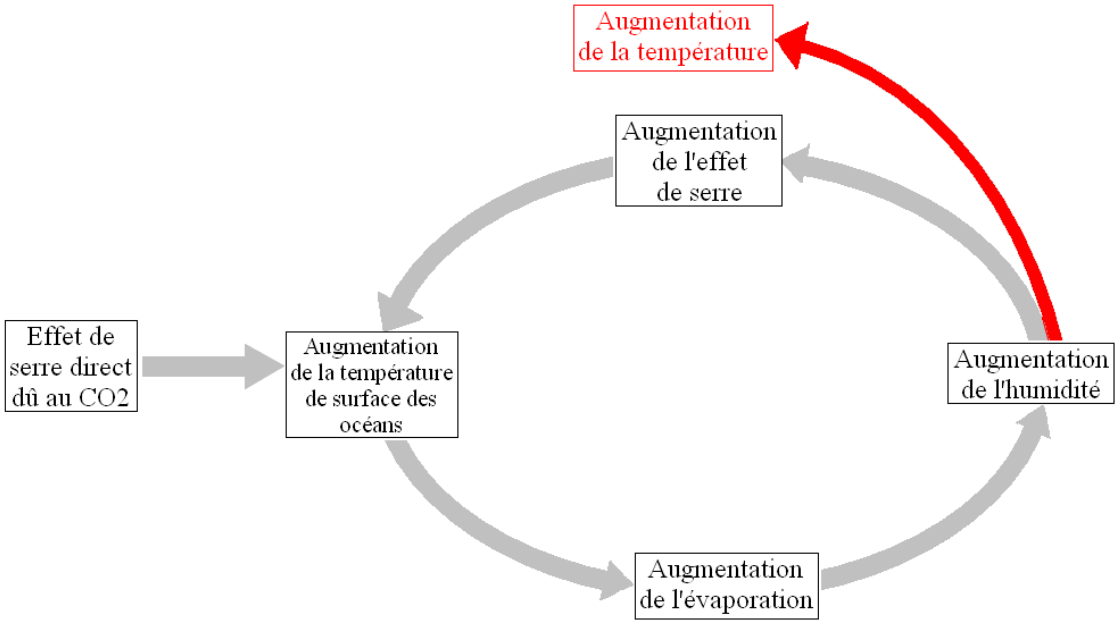


Figure I.2: Représentation schématique du phénomène de « rétro-action positive de la vapeur d'eau »

Les molécules présentes dans l'atmosphère et impliquées dans l'effet de serre sont principalement l'eau H_2O, le dioxyde de carbone CO_2, le méthane CH_4, le protoxyde d'azote N_2O. La faculté de ces gaz à participer à l'effet de serre dépend non seulement de leur concentration mais aussi de leur pouvoir de réchauffement global (PGR). Le PGR est défini comme le forçage radiatif (*i.e.* la puissance radiative renvoyée vers le sol) cumulé sur une durée de 100 ans (qui est la durée de séjour du CO_2 dans l'atmosphère) rapporté sur celui du CO_2 (Tableau I.1). Cependant, parmi ces gaz l'impact de l'eau sur le réchauffement climatique est plus difficile à chiffrer. En effet l'augmentation de température due aux émissions anthropiques entraîne une augmentation de

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

l'évaporation de l'eau (et également de la tension de vapeur saturante), donc de la concentration en vapeur d'eau de l'atmosphère. Cela mène à une nouvelle hausse de la température,... C'est l'impact de ce phénomène appelé « rétro-action positive de la vapeur d'eau » sur le réchauffement climatique qui est difficilement estimable. Mais des études récentes, basées sur des simulations numériques de l'atmosphère, ont montré que cet effet pouvait multiplier par un facteur 2,5 l'effet de serre anthropique initial [2].

En prenant en compte tous ces éléments, on peut estimer la participation à l'effet de serre des molécules citées précédemment (Figure I.3), et on s'aperçoit alors que la vapeur d'eau est responsable de plus de la moitié de l'effet de serre naturel.

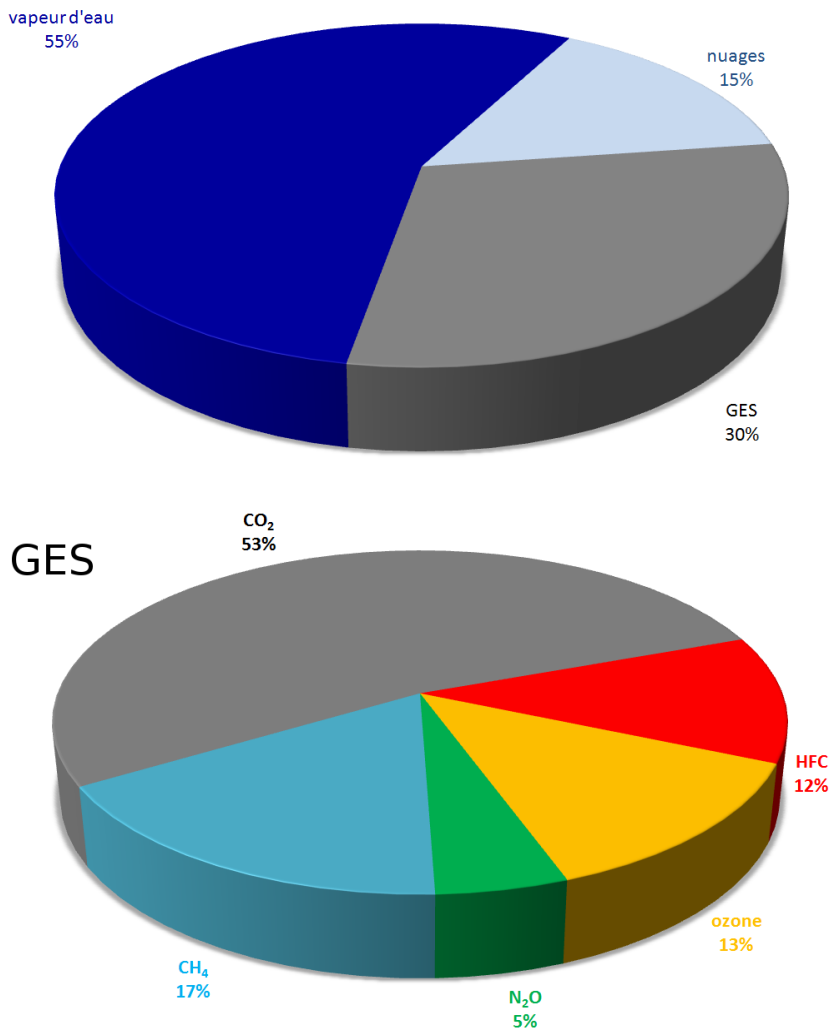


Figure I.3: Répartition des contributions à l'effet de serre des différents constituants atmosphériques (GIEC 2007 [1])

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

1.2 Effet de serre anthropique

Si l'on a pu voir ci-dessus que l'effet de serre était un phénomène naturel et bénéfique, essentiel à la vie terrestre, il n'en est pas de même de l'effet de serre dit anthropique. Sous ce qualificatif se cache l'effet de serre dû aux activités humaines. Parmi les rejets mis en cause se trouve principalement le dioxyde de carbone (Figure I.4) (l'eau n'est pas prise en compte au vu de sa faible durée de séjour dans l'atmosphère). Effectivement on peut constater (Figure I.5) que depuis l'avènement de l'ère industrielle la concentration en CO_2 atmosphérique a crû de manière monotone avec un emballement lors de ces 50 dernières années. Parallèlement la température moyenne a elle aussi augmentée, avec un décalage de 2 à 3 décennies. Ce décalage entre les courbes de concentration en CO_2 et de température est dû à l'inertie du système atmosphérique.

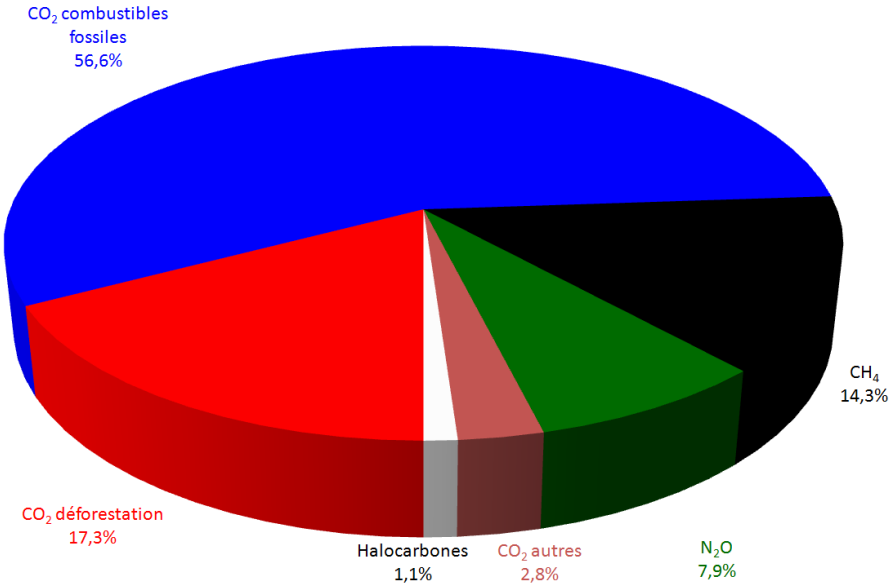


Figure I.4: Répartition des émissions humaines des différents gaz à effet de serre (GIEC 2007)

Cette augmentation de la concentration en CO_2 provient de la perturbation du cycle naturel (Figure I.6) du carbone. Dans le système Terre, le carbone est stocké sous différentes formes dans l'atmosphère, les océans, la biosphère (photosynthèse-respiration) et la lithosphère (carbonates). Les échanges entre ces différents puits sont en temps normal équilibrés. Cependant les activités humaines viennent perturber cet équilibre qui va alors être déplacé pour tenter de compenser cet apport supplémentaire. Ainsi les activités humaines rejettent actuellement environ 8 Gt/an de carbone (sous forme CO_2) à partir de la combustion des énergies fossiles. La végétation va, en plus de la quantité absorbée naturellement, assimiler 32,5% de ce flux de carbone anthropique tandis que les océans vont eux aussi absorber 2,2 Gt/an de cet excédent (pouvant entraîner une acidification

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

néfaste pour les espèces aquatiques comme le corail). Au final, les émissions humaines nettes peuvent être estimées à 3 Gt/an, qui vont rester sous la forme de CO_2 atmosphérique avec les conséquences vues précédemment.

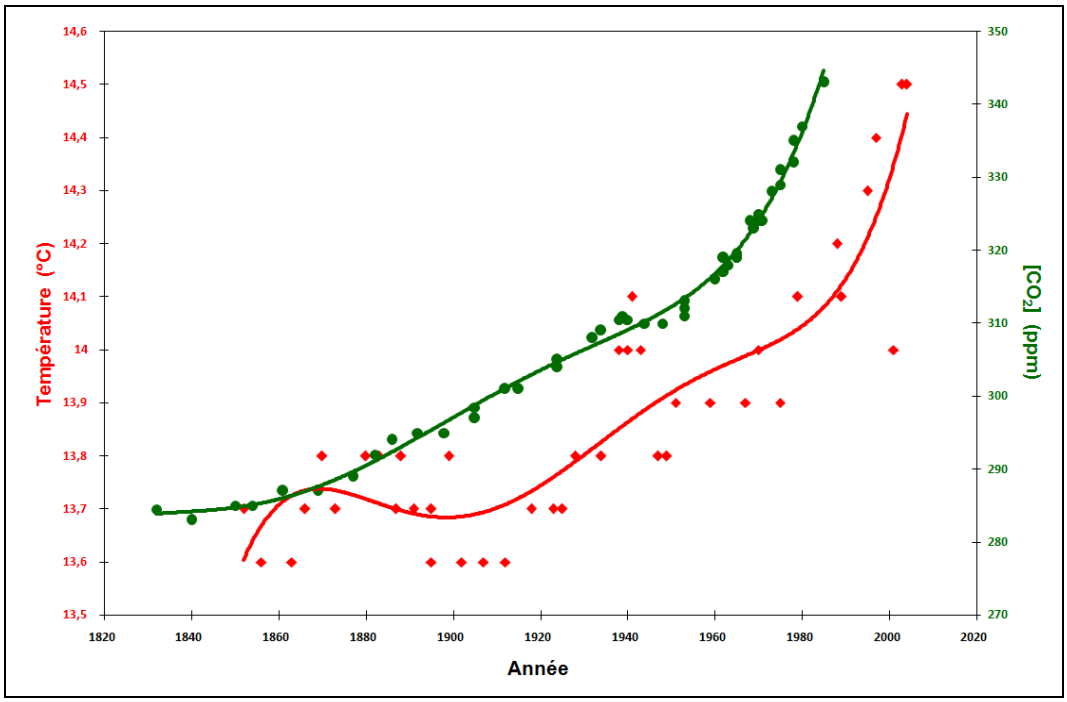


Figure I.5: Évolution de la température (GIEC 2007 [1]) et de la concentration en CO_2 (Etheridge, 1996 [3]) dans l'atmosphère durant les 19ème et 20ème siècles

1.3 Mesures de lutte contre les émissions de gaz à effet de serre

Ayant pris conscience des problèmes posés par le rejet des gaz à effet de serre et de l'augmentation consécutive de la température, de nombreux pays se sont réunis et ont d'un commun accord décidé de diminuer ou stabiliser leurs émissions de GES.

La première démarche entreprise dans ce sens fut la création dès 1968 du « club de Rome », organisation non gouvernementale regroupant scientifiques, économistes, hommes d'affaires, fonctionnaires, ... L'étape la plus significative de cette prise de conscience fut en 1997 la mise en place du protocole de Kyoto, ratifié à ce jour par 172 pays (dont ne font pas partie les États-Unis, pourtant 1er émetteur de GES au niveau mondial). A travers ce protocole, l'Union Européenne s'est engagée à réduire d'ici 2012 ses émissions de 8% par rapport à ce qu'elles étaient en 1990, et a assigné à la France l'objectif de les stabiliser. Cependant cette diminution ne sera pas suffisante pour enrayer l'augmentation de température à la fin de ce siècle, et de nouveaux accords internationaux sont en cours de négociation, comme ce fut le cas à Bali en décembre 2007.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

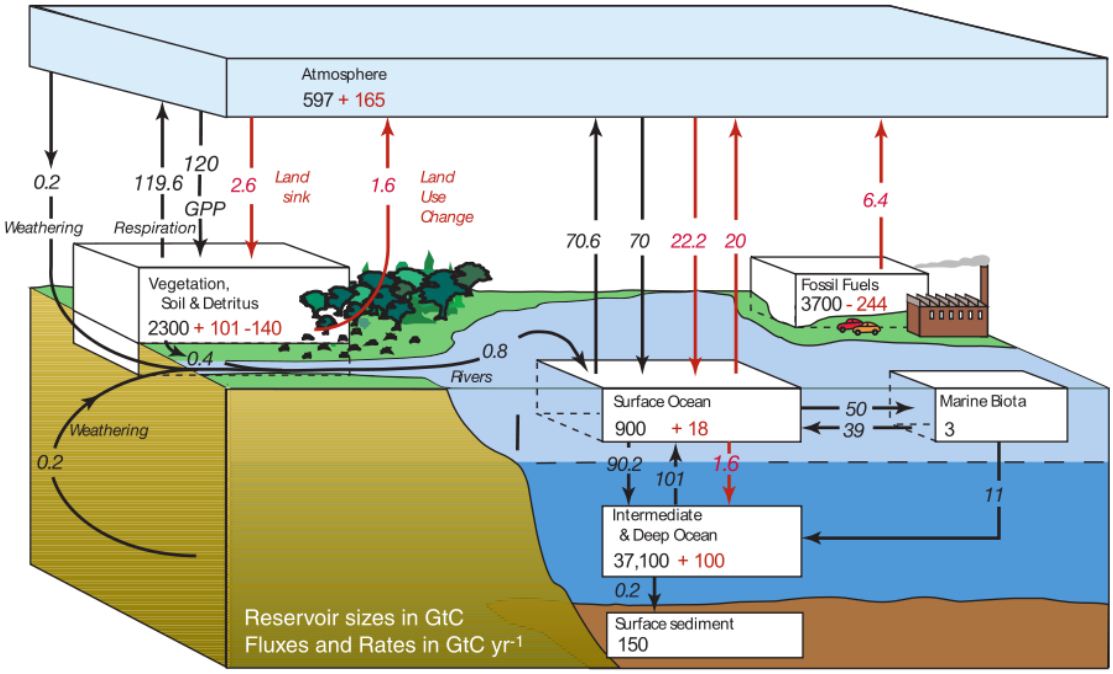


Figure I.6: Représentation du cycle du carbone(en noir: flux naturels; en rouge: flux anthropogéniques) [1]

L'Europe quant à elle souhaite se dresser en exemple de la lutte contre le réchauffement climatique. Elle s'est fixée pour objectif une diminution de 20% de ses émissions de GES par rapport à 1990 à l'horizon 2020, couplée à une utilisation à hauteur de 20% des énergies renouvelables dans son panel énergétique.

Lors de son dernier rapport, le GIEC (Groupement d'expert Intergouvernemental sur l'Évolution du Climat) a indiqué que pour limiter et contenir la hausse des températures, il faudrait maintenir à l'horizon 2100 la concentration en CO_2 à son niveau actuel. Cependant il faudrait pour cela diminuer par 2 les émissions actuelles de gaz à effet de serre sur toute la planète dès 2050. Étant donné que les actuels pays développés sont aujourd'hui les plus gros émetteurs de GES et que l'on ne peut légitimement pas empêcher le développement des autre pays, il revient donc à ces pays développés de fournir les plus gros efforts. A ce titre, l'Europe, et par conséquence la France, s'est engagée à réduire d'un facteur 4 ses émissions de GES (toujours par rapport à 1990) à l'échéance 2050.

Pour réaliser ce défi, il est crucial de déterminer les paramètres sur lesquels on pourra agir. L'équation de Kaya, proposé par le professeur du même nom en 1992 lors du sommet de la Terre de Rio, permet d'identifier les principaux paramètres responsables des émissions de gaz à effet de serre. Dans cette équation (Équation I.1), GES représente la quantité de gaz à effet de serre émis,

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

TEP la quantité d'énergie utilisée au niveau mondial, PIB le produit intérieur brut moyen mondial et POP la population mondiale.

$$GES = \frac{GES}{TEP} \times \frac{TEP}{PIB} \times \frac{PIB}{POP} \times POP$$

Équation I.1: Équation de Kaya

Ainsi si l'on suppose, d'après les estimations récentes, que la population mondiale (POP) sera multipliée par 3/2 d'ici 2050 [1] et que la richesse créée par habitant (PIB/POP) sera multipliée par 4, et que l'on veuille diminuer les émissions de GES par 2, il faudra diminuer le produit du contenu en carbone de l'énergie utilisée par l'intensité énergétique d'un facteur 12. Cela signifie qu'il faudra grandement améliorer notre efficacité énergétique et développer des filières non émettrices de CO_2 (solaire, éolien, nucléaire,...) qui tiendront des places prépondérantes.

1.4 Cas du transport routier

Parmi les efforts que les pays devront fournir, une part importante reviendra au domaine des transports routiers. Ainsi à l'heure actuelle, les transports routiers sont responsables en France de 24,5% des émissions de gaz à effet de serre (soit 126 Mt de CO_2; chiffres 2006, CITEPA [4], Figure I.7), et cette contribution a augmenté de 20% depuis 1990 (cependant les émissions en valeur absolue se sont stabilisées depuis 2000) alors que dans le même temps les émissions globales diminuaient de 4%.

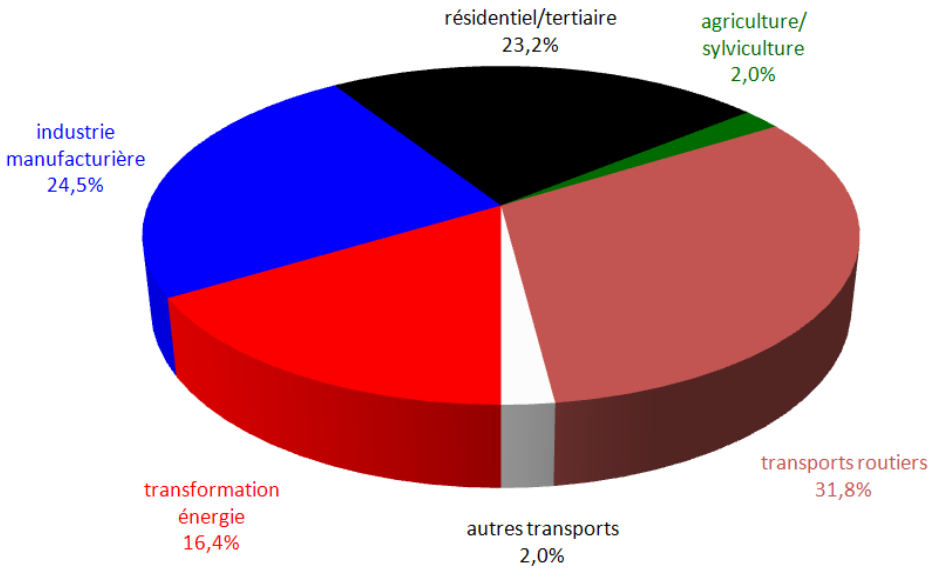


Figure I.7: Part du transport routier dans les émissions de CO_2 en France en 2006 [4]

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

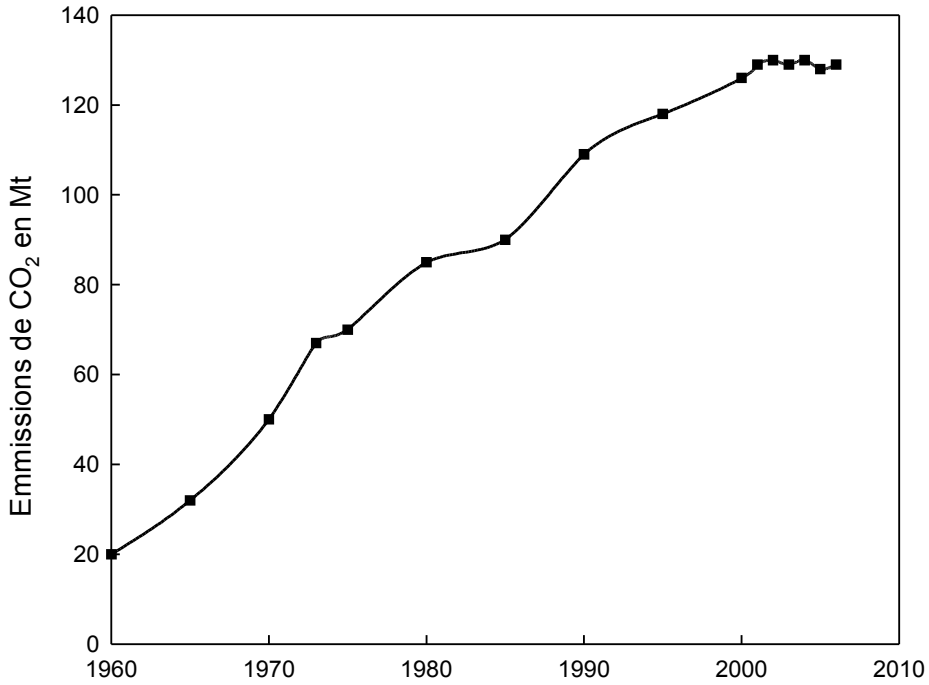


Figure I.8: Évolution des émissions de CO_2 du secteur routier en France depuis 1960 [4]

Cette augmentation s'explique par l'augmentation du trafic routier, qui a elle-même plusieurs causes: la croissance du parc automobile français (+1% par an depuis 2000), la voiture étant devenue un bien de consommation courant, et la péri-urbanisation, faisant de l'automobile un moyen de déplacement rapide et pratique.

Le secteur automobile va donc devoir diminuer ses émissions de GES, ce qui va nécessiter beaucoup d'efforts, aussi bien du côté des constructeurs que des usagers. L'Union Européenne imposera dès 2012 un plafonnement des émissions de CO_2 de 120g/km [5] aux voitures neuves, alors que jusqu'à présent aucune réglementation ne s'appliquait, même si le taux moyen d'émission avait diminué régulièrement depuis 1995 (Figure I.9) et que les constructeurs s'étaient fixé l'objectif de 140 g/km en 2008.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

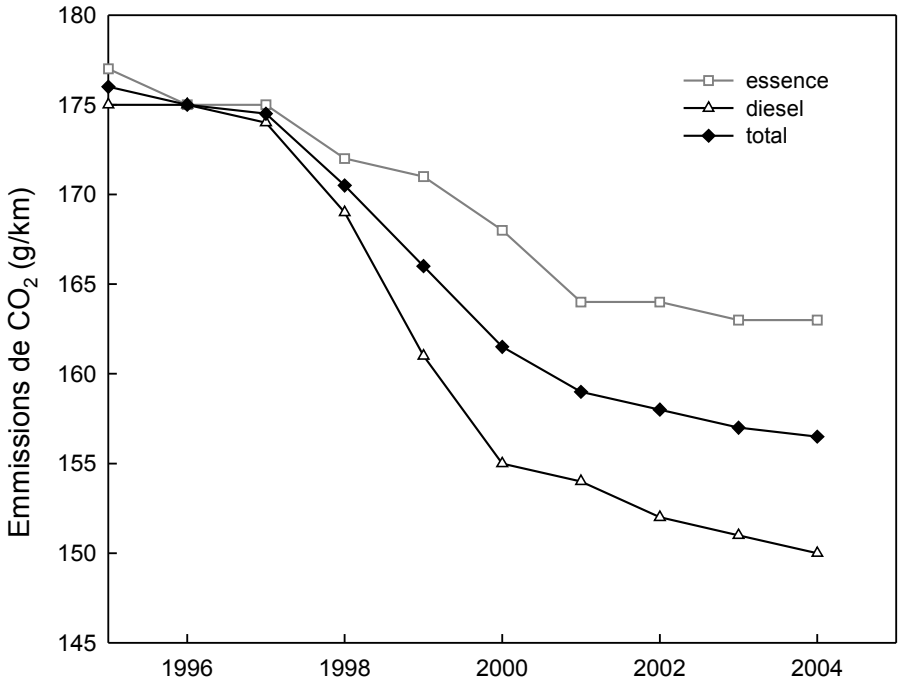


Figure I.9: Émission moyenne en CO_2 des véhicules automobiles en France depuis 1995 [6]

2. La pollution automobile

Le transport routier, outre sa participation importante dans l'émission des GES, est également pointé du doigt en ce qui concerne l'émission de composés polluants. Ces composés, présentés plus bas, ont un fort impact sur la qualité de l'air et par conséquent sur la santé, et font depuis de nombreuses années l'objet de réglementations de plus en plus restrictives.

2.1 Principaux polluants automobiles

a) Polluants communs

Un des principaux polluants générés par le transport routier est le monoxyde de carbone CO. Il provient de la combustion incomplète des carburants. CO est un composé toxique qui se fixe de manière irréversible sur l'hémoglobine (formant la carboxyhémoglobine) pouvant entraîner des troubles en concentration trop élevée. En 2006, le secteur du transport routier français a émis 1230 kt de CO correspondant à 24% des émissions totales en France (source CITEPA).

Les oxydes d'azote NO_x sont les 2èmes polluants automobiles majoritaires. Le monoxyde d'azote NO est formé à haute température principalement à partir de l'azote de l'air selon le mécanisme du NO thermique proposé par Zeldovich [7] et complété par Fenimore [8]:

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

$$N_2+O=NO+N$$
$$N+O_2=NO+O$$
$$N+OH=NO+H$$

Le monoxyde d'azote est un gaz qui a un fort impact sur la pollution photochimique (smog). En effet il favorise la formation d'ozone troposphérique à partir de l'oxygène de l'air selon le mécanisme représenté sur la figure I.10. L'ozone ainsi généré est un composé pouvant provoquer au-delà d'une concentration limite des gènes respiratoires. En 2006 les émissions de NO_x dues au trafic routier s'élevaient en France à 726 kt, soit 54% des émissions totales.

De la même manière que le monoxyde de carbone provient d'une combustion incomplète, les moteurs automobiles peuvent générer des hydrocarbures imbrûlés. Parmi ces hydrocarbures imbrûlés, appelés plus généralement COV (Composés Organiques Volatils), on distingue le méthane (CH_4) des autres espèces regroupées alors sous l'appellation COVNM (composés organiques volatils non méthaniques). Ces composés, outre leur impact sur l'effet de serre expliqué plus tôt, vont également intervenir dans les mécanismes de formation de l'ozone troposphérique en favorisant l'oxydation du monoxyde d'azote en dioxyde d'azote.

Les émissions de méthane ont été chiffrées en 2006 à 2640 kt, dont moins de 1% sont imputables au transport routier. Par contre ce secteur a participé à hauteur de 16%, soit 219 kt aux émissions de COVNM.

b) Polluants spécifiques

Les polluants décrits jusqu'à présent sont générés aussi bien par les véhicules à motorisation essence que ceux à motorisation diesel. Cependant chacun de ces véhicules présentent des émissions spécifiques comme le protoxyde d'azote N_2O pour les moteurs essence et les particules pour les moteurs diesel.

Le protoxyde d'azote (ou oxyde nitreux) est formé sur les véhicules essence non pas au sein de la chambre de combustion mais lors du passage des effluents gazeux sur le catalyseur 3 voies. En effet le catalyseur, qui permet de réduire NO en N_2 et d'oxyder CO et les COV, peut générer via des réactions parasites N_2O selon [10]:

$$2NO+CO=N_2O+CO_2$$
$$2NO+H_2=N_2O+H_2O$$

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

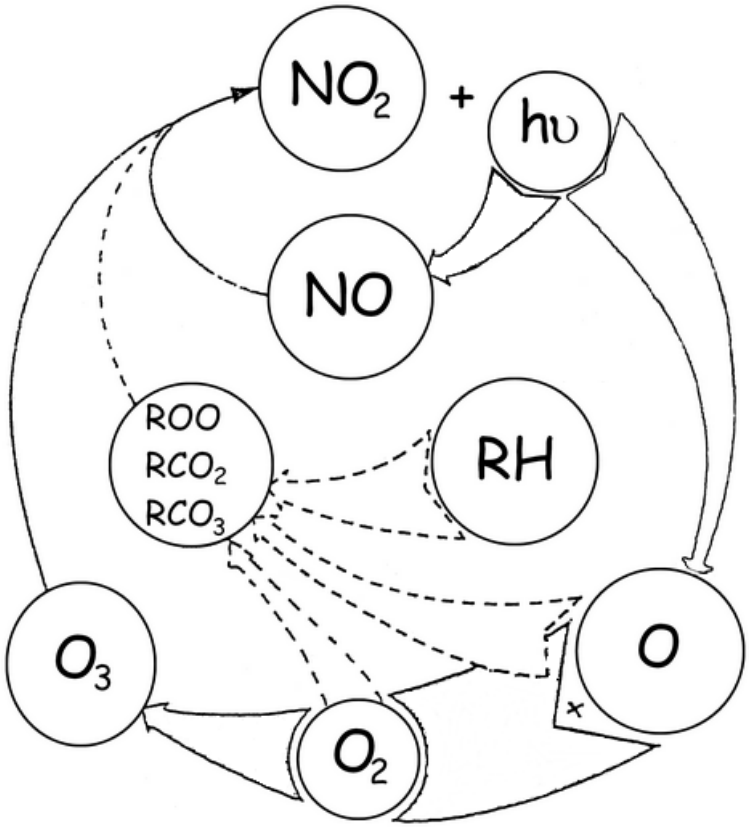


Figure I.10: Cycle de l'ozone troposphérique [9]

Le protoxyde d'azote est un puissant gaz à effet de serre dont le pouvoir de réchauffement global est 298 fois supérieur à celui du CO_2. Cependant les émissions de N_2O à partir des véhicules routiers restent modestes (2 kt en France en 2006) même si elles ont tendance à augmenter, représentant 1% des émissions totales en France.

Concernant les particules, émises par les moteurs diesel, elles proviennent de l'existence de zones riches dans la chambre de combustion entraînant une oxydation partielle, voire une pyrolyse du carburant aboutissant après un mécanisme complexe à la formation des particules de suies. Ces particules sont classées selon leur taille (PM_{10}, $PM_{2,5}$ et $PM_{1,0}$, particules ayant un diamètre inférieur à 10, 2,5 et 1 µm respectivement), taille dont dépend leur toxicité. En effet ces particules sont inhalées et pénètrent les voies respiratoires, et ce plus profondément si la particule est petite. Elles vont alors entraîner des gènes respiratoires et favoriser l'apparition de cancers.

2.2 *Une réglementation de plus en plus contraignante*

On a pu voir lors du paragraphe précédent que les véhicules routiers étaient émetteurs de nombreuses espèces en relation directe avec l'effet de serre et la pollution atmosphérique. Les

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

gouvernements, au fait de ces constatations, ont depuis de nombreuses années édicté des réglementations afin de limiter l'impact sanitaire du transport routier.

La première norme antipollution a vu le jour en 1972 en Californie, et fixait des limites d'émission pour les 3 polluants majoritaires (CO, HC, NO_x). Ces normes se sont ensuite développées et étendues aux autres pays. Elles ont fixé des limites d'émission de plus en plus basses, et imposé certains dispositifs de réduction des émissions, dont le plus emblématique est le pot catalytique.

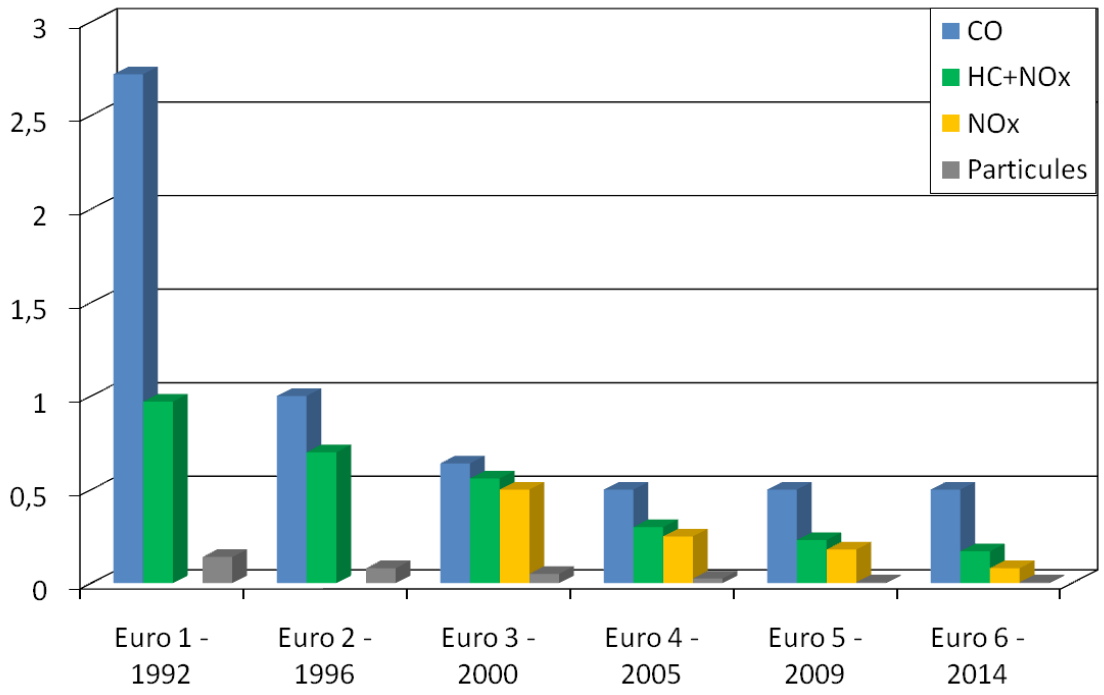


Figure I.11: Limites d'émissions des véhicules diesel sur le marché européen [9]

En Europe, ces normes (baptisées Euro 1,2,...) [11] sont apparues dès 1990 et sont réévaluées régulièrement (tous les 3 à 5 ans), abaissant les taux d'émission autorisés (Figure I.11). Actuellement s'applique la norme Euro 4 qui impose aux véhicules diesel de ne pas rejeter plus de 500 mg/km de CO, 250 mg/km de NO_x et 25 mg/km de particules. Dès 2009 la norme Euro 5 imposera une réduction supplémentaire de 70 mg/km des plafonds d'émission de NO_x, et divisera par 5 le plafond des émissions en particules. A moyen terme (2014), la norme Euro 6 abaissera de nouveau ces limites d'émission (80 mg/km de NO_x et 170 mg/km de NO_x+HC).

Les constructeurs automobiles se retrouvent donc face à un double défi, représenté schématiquement sur la figure I.12: d'une part limiter l'émission des gaz à effet de serre (CO_2), ce qui passera par une baisse de la consommation des véhicules, et d'autre part de limiter les émissions

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

des composés polluants, tout cela de manière rapide et compatible avec les systèmes de distribution actuels.

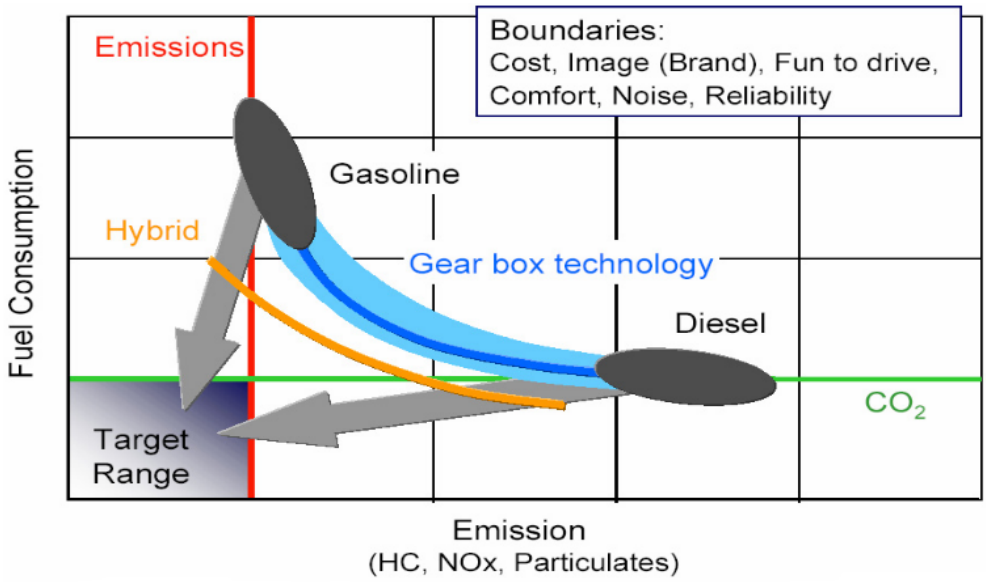


Figure I.12: Représentation schématique du défi posé aux constructeurs automobiles (source AVL)

3. Vers une évolution du couple carburant-moteur

3.1 Un problème, des solutions...à long terme

Conscient du problème qui se présentaient à eux, les constructeurs automobiles français ainsi que les différents organismes publics liés aux problèmes énergétiques (IFP, ADEME) se sont concertés pour déterminer les paramètres clés et les stratégies à adopter pour atteindre l'objectif du « facteur 4 ». Les différents scénarios envisagés par cette feuille de route [12] sont les suivants:

- réduction de la demande énergétique des véhicules: cela passera par une réduction drastique de la masse des véhicules, à contre-courant des tendances actuelles (la masse moyenne des véhicules diesel est passée de 1050 kg en 1990 à 1300 kg en 2003 [6]), associée à une meilleure efficacité des moteurs thermiques

- segmentation du secteur automobile: émergence de véhicules spécifiquement dédiés à un usage urbain et émettant peu ou pas de CO_2

- dominance des moteurs électriques: l'énergie électrique nécessaire à ces moteurs sera produite soit à partir de l'hydrogène via les piles à combustibles soit à partir d'autres sources (éolien, solaire, nucléaire,...) n'émettant peu ou pas de GES

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Ces différents scénarios sont des visions à long-terme et pour la plupart nécessitent des technologies qui ne sont pas encore à maturité. Des solutions à court-terme doivent cependant être mises en place pour respecter les réglementations actuelles et à venir, et ce à partir des technologies actuelles et/ou de technologies rapidement maîtrisables.

3.2 Des évolutions à court-terme

Les solutions envisageables à court-terme font intervenir des modifications et améliorations sur les technologies moteurs actuelles ainsi que sur les dispositifs de post-traitement des gaz d'échappement. Une autre clé pour limiter les émissions de GES est la reformulation des carburants et notamment l'utilisation des agrocarburants.

a) Les biocarburants et agrocarburants

Les biocarburants sont des hydrocarbures produits à partir de la biomasse. Dans le cas des carburants essence il s'agit de l'éthanol, produit à partir des plantes sucrières (betterave, canne à sucre). Quant aux carburants diesel, les espèces concernées sont les esters d'huile végétale produits à partir des graines de plantes oléagineuses (colza, tournesol, soja, palme).

Ils présentent l'avantage d'avoir un bilan carbone du « puits à la roue » bien inférieur à celui des produits pétroliers standards. Cependant leur production provoquent de nombreux débats dans la société par la concurrence qu'ils engendrent avec les besoins alimentaires des populations. De plus les quantités produites sont somme toute assez limitées, et ne peuvent se substituer qu'à une faible partie du carburant d'origine fossile. Les voies de production dites de seconde génération promettent une augmentation de la production de ces carburants, sans concurrence avec les utilisations alimentaires de cette biomasse.

L'utilisation des biocarburants permet donc de résoudre une partie du problème sur l'émission des GES, mais ne résout en rien les problèmes d'émissions de polluants. Si l'on excepte les solutions de post-traitement, qui seront toujours nécessaires au traitement des effluents, la solution viendra d'une évolution des technologies moteurs.

b) De nouvelles technologies moteur

Comme il a été indiqué plus haut, de nouvelles technologies moteurs plus propres et plus sobres vont devoir être développées. Les motoristes envisagent plusieurs solutions, dont certaines sont d'ores et déjà appliquées comme l'hybridation (Toyota Prius) ou le « downsizing »

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

L'hybridation consiste à adjoindre à un véhicule muni d'un moteur thermique un moteur électrique. L'énergie utilisée par le moteur électrique est générée lors du freinage: l'énergie cinétique perdue lors de la phase de ralentissement est récupérée et stockée sous forme électrique dans des batteries avant d'être réutilisée par le moteur électrique. Quel que soit le moteur utilisé, l'énergie primaire vient donc toujours du carburant et ne nécessite donc pas un rechargement des batteries à partir d'un réseau électrique. Ces véhicules permettent des gains en consommation non négligeables (diminution de 10 à 50% selon le type de trajet et le degré d'hybridation). Quant au rejets de polluants gazeux, ils sont également plus faibles que ceux d'une voiture essence classique. Actuellement les véhicules hybrides embarquent un moteur à allumage commandé en guise de moteur thermique. Certains constructeurs ont également lancé des travaux portant sur l'hybridation non plus avec un moteur essence, mais avec un moteur Diesel qui a, à la base, une plus faible consommation de carburant. Ainsi les perspectives en terme d'émission en CO_2 s'annonce prometteuses, aux alentours de 90g/km de CO_2 aux 100 km.

Le « downsizing » ou suralimentation consiste à réduire la cylindrée des moteurs sans pour autant diminuer leur puissance ou d'augmenter leur puissance tout en conservant une cylindrée équivalente. Si l'on considère la première application, elle permet de réduire la consommation des véhicules grâce à la limitation des pertes par pompage, des pertes de chaleur aux parois et des pertes par friction. Le maintien de la puissance malgré une capacité volumique plus faible se fait au travers d'une augmentation des taux de compression, grâce notamment à une pression d'injection des réactifs plus élevée. Cependant cette augmentation des taux de compression provoquent l'apparition de différents problèmes. Ainsi le cliquetis (auto-inflammation du mélange réactif en amont du front de flamme), qui est un problème rencontré depuis longtemps sur les moteurs essence et qui est aujourd'hui maîtrisé, peut réapparaître. De plus l'augmentation des pressions nécessitent également l'utilisation de matériaux ayant une résistance mécanique et thermique plus importante.

Le « downsizing » permet donc de limiter les émissions de GES, mais ne résout pas le problème des émissions polluantes, même s'il peut toujours être associé à un pot catalytique pour le traitement des gaz d'échappement.

Une autre technologie moteur envisagée et qui s'avère extrêmement prometteuse, est la technologie CAI (Controlled AutoIgnition) dans le cas de l'utilisation d'un carburant essence et la technologie HCCI (Inflammation par Compression d'une Charge Homogène) dans le cas des carburants diesel. Ces technologies sont présentées au paragraphe suivant.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

4. Le moteur HCCI

4.1 Principe de fonctionnement

Le principe de fonctionnement (figure I.13) du moteur HCCI repose sur l'auto-inflammation d'un mélange homogène air-carburant suite à l'augmentation de température et de pression due à la compression par le piston. Il apparaît par conséquent comme un hybride entre le moteur essence, dont il reprend le principe du mélange air/carburant homogène, et le moteur Diesel, reposant sur l'auto-inflammation du mélange réactif.

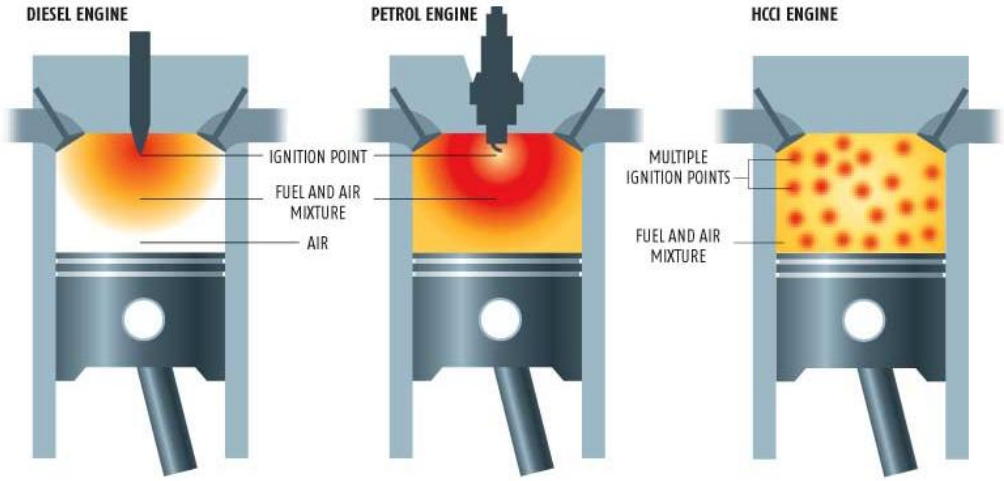


Figure I.13: Principe de fonctionnement des moteurs conventionnels et du moteur HCCI

Lors de la combustion, les températures atteintes dans le moteur restent modérées (T<1000 K) mais le dégagement de chaleur est très rapide. Il est dons obligatoire de freiner la réaction (et donc la libération de chaleur). Pour cela le mélange réactif est dilué soit dans un large excès d'air soit dans une forte proportion (40-70%) par les gaz d'échappement (Exhaust Gas Recirculation). Quoi qu'il en soit, il en résulte que le mélange présent dans la chambre de combustion est un mélange pauvre.

Dans les conditions rencontrées dans les moteurs HCCI, la formation de 2 des principaux polluants aujourd'hui réglementés est réduite: les faibles températures de combustion limitent la formation d'oxydes d'azote par voie thermique ainsi que la formation de particules de suies, favorisée dans les zones de richesse élevée et par les hautes températures.

Enfin, maîtrisée, la combustion HCCI présente un excellent rendement énergétique, et permet donc une diminution de la consommation en carburant.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

4.2 Limites et contraintes

Même si le principe du fonctionnement du moteur HCCI s'avère simple, la mise au point de cette technologie pose néanmoins de nombreuses contraintes techniques. D'une part il s'avère primordial que les conditions en fin de compression permettent l'inflammation spontanée du mélange gazeux, ce qui nécessite le contrôle à la fois du taux de compression, de la température et de la pression d'admission des gaz, du taux de dilution par l'EGR, ce qui n'est possible qu'au moyen de dispositifs électroniques. De plus comme lors du « downsizing » peuvent apparaître des phénomènes de cliquetis (inflammation du mélange avant la fin de la compression) et d'importantes contraintes mécaniques et thermiques.

D'autre part les températures de combustion restant relativement faibles il se forme d'importantes quantités de CO et d'hydrocarbures imbrûlés, quantités qui peuvent être réduites par la recirculation des gaz (EGR), et qui nécessitent la présence d'un système de post-traitement des gaz de combustion.

Un autre problème posé par ce type de moteur est la plage de fonctionnement accessible. Aux plus faibles charges, la température en fin de compression peut s'avérer trop faible pour que le mélange puisse s'enflammer, entraînant une instabilité du moteur. Par contre aux charges les plus élevées, la combustion devient difficilement contrôlable et entraîne l'apparition de cliquetis générant de forts taux de bruits. Les véhicules ne peuvent donc pas être équipés exclusivement de ce type de moteur, qui doit être capable de commuter, hors de sa plage de fonctionnement optimal, vers un mode de combustion classique.

Enfin un dernier problème, et non des moindres, posé par ce type de moteur est le phasage de l'auto-inflammation. Alors que dans les deux modes de combustion classiques l'inflammation est déclenchée par des évènements extérieurs (étincelle de la bougie pour le moteur essence, injection du carburant pour le moteur Diesel), elle est ici contrôlée par la cinétique chimique, qui est dépendante de la composition du carburant et des conditions thermodynamiques (pression, température).

La maîtrise de ce mode de combustion représente donc un défi technique (dispositifs de contrôle) et scientifique (nécessité de prédire l'auto-inflammation en fonction des conditions internes).

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

5. Le gazole

5.1 Origine et caractéristiques

Le gazole, carburant de plus en plus utilisé en Europe occidentale [6], provient de la distillation et du raffinage du pétrole brut. Les coupes utilisées pour sa fabrication sont des coupes lourdes dont le point d'ébullition est compris entre 200 et 350°C. Ces coupes sont constituées en grande majorité d'hydrocarbures comprenant plus de 9 atomes de carbone.

La qualité d'un gazole pour son utilisation en moteur se mesure grâce à son indice de cétane. L'indice de cétane permet de mesurer l'aptitude d'un carburant de type gazole à s'auto-enflammer. L'échelle d'indice de cétane est déterminée à partir de 2 hydrocarbures de référence: le cétane ou n-hexadécane (n-$C_{16}H_{34}$) dont l'indice de cétane est égal à 100 et de l'α-méthylnaphtalène ($C_{11}H_{10}$) dont l'indice associé vaut 0. On utilise également comme référence basse l'heptaméthylnonane dont l'indice de cétane est de 15. L'indice de cétane d'un mélange d'hydrocarbure quelconque est déterminé expérimentalement sur un moteur CFR diesel, et correspond à la proportion de n-cétane d'un mélange binaire cétane/α-méthylnaphtalène possédant le même comportement. Le gazole commercial a ainsi un indice de cétane de 51. Cet indice de cétane peut également être estimé à partir des propriétés physiques de ce gazole au moyen de relations empiriques.

5.2 Un produit réglementé

En Europe, la directive 98/70/CE modifiée par la directive 2003/1/CE [13] fixe la qualité et les caractéristiques des carburants essence et gazole (Tableau I.2). Ainsi la masse volumique du gazole à 15°C ne peut excéder 0,845 $kg.L^{-1}$. De la même manière, la teneur maximale en soufre est égale à 50 ppm depuis janvier 2005 et passera à 10 ppm en janvier 2009, tandis que la teneur en hydrocarbures aromatiques polycycliques ne peut dépasser 11% en masse.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Paramètre	Unité	Limites		Essai	
		minimum	maximum	méthode	Date de publication
Indice de cétane		51		EN-ISO 5165	1992
Masse volumique à15 °C	kg/m^3		845	EN-ISO 3675	1995
Distillation: point 95%	°C		360	EN-ISO 3405	1988
Hydrocarbures aromatiques polycycliques	% m/m		11	IP 391	1995
Teneur en soufre	mg/kg		10	pr-EN-ISO/DIS 14596	1996

Tableau I.2: Caractéristiques réglementées des carburants gazoles en Europe

5.3 *Composition chimique d'un gazole.*

Les gazoles commerciaux sont composés de plusieurs milliers d'hydrocarbures. Ces hydrocarbures sont constitués de 7 à plus d'une vingtaine d'atomes de carbone, avec néanmoins une majorité de molécules possédant entre 10 et 14 atomes de carbone.

Ces hydrocarbures se répartissent également en 4 grandes familles chimiques (Figure I.2): les paraffines (38,1%), les composés naphténiques (31,1%), les composés aromatiques (24,5%) et polyaromatiques (6,3%).

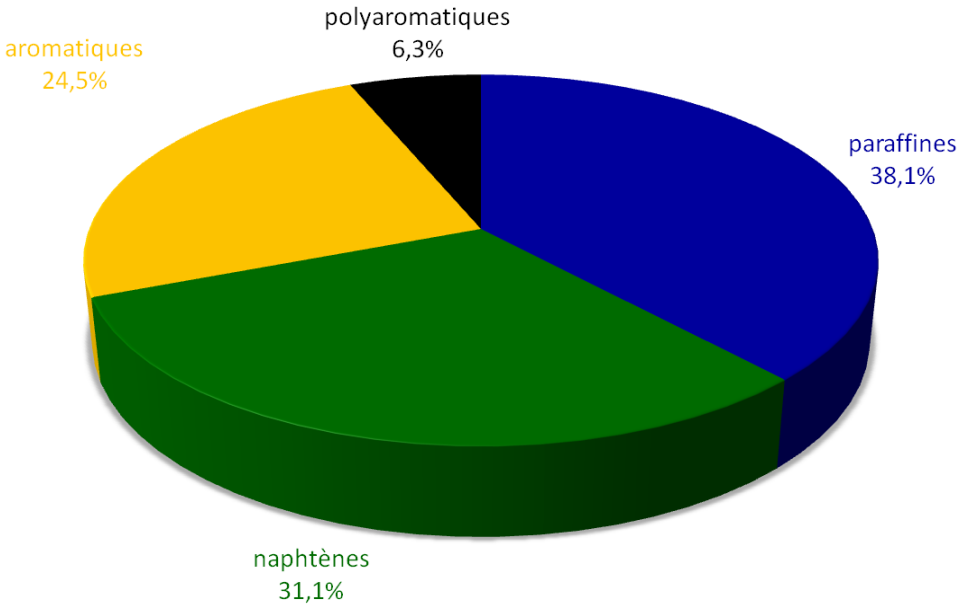


Figure I.14: Composition massique d'un gazole commercial en terme de famille chimiques (source Total)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Ainsi, si on veut étudier l'oxydation du gazole, il est nécessaire de simplifier drastiquement la composition du carburant en utilisant des mélanges modèles (surrogates) qui possèdent néanmoins des propriétés chimiques (masse molaire et nombre de carbone) et physiques proches de celle d'un gazole commercial. De plus ces composés modèles doivent appartenir aux différentes familles chimiques constitutives du gazole et être présents dans des proportions représentatives de celles du carburant commercial. Au vu de ces considérations, l'utilisation comme carburant modèle d'un mélange décane/propylcyclohexane/butylbenzène 40/30/30 (mole/mole/mole) apparaît assez représentatif de la composition d'un gazole commercial.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

CONCLUSION

Le monde se retrouve aujourd'hui face à un problème d'envergure menaçant à long terme sa survie et son développement. Les émissions de GES, en constante augmentation depuis maintenant un siècle, doivent diminuer pour limiter au maximum la hausse de la température moyenne terrestre à long terme. Une part importante de ces efforts échoue au secteur automobile qui est responsable d'une large part des émissions globales. D'autre part le secteur automobile doit également limiter ses rejets de polluants gazeux à l'échappement (NOx, HC, CO, particules).

Ces objectifs passeront nécessairement par des évolutions technologiques. Parmi ces technologies, la combustion en mode HCCI apparaît prometteuse à court terme: elle permet de limiter la formation des NOx et de particules. Cependant la maîtrise de cette technologie nécessite encore de nombreux travaux de recherche, et notamment des travaux sur les aspects cinétiques de la chimie d'oxydation des carburants, qui jouent un rôle important pour la prévision de la combustion des carburants.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

© 2009 Tous droits réservés.

http://doc.univ-lille1.fr

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

[1] Intergovernmental Panel on Climate Change, 2007, http://www.ipcc.ch

[2] R. Philipona, B. Dürr, A. Ohmura and C. Ruckstuhl

Anthropogenic greenhouse forcing and strong water feedback increase temperature in Europe, Geophysical Research Letters, 2005, vol. 32, pp.

[3] D. M. Etheridge, L. P. Steele, R. L. Langenfelds and R. J. Francey

Natural and anthropogenic changes in atmospheric CO2 over the last 1000 years from air in Antarctic ice and firn, Journal of Geophysical Research, 1996, vol. 101, pp. 4115-4128

[4] CITEPA, http://www.citepa.org

Substances relatives à l'accroissement de l'effet de serre (mise à jour mai 2008)
Substances relatives à l'acidification, l'eutrophisation et à la pollution photochimique (mise à jour mai 2008)

[5] Communication de la Commission au Conseil et au Parlement européen du 7 février 2007 intitulée « Résultats du réexamen de la stratégie communautaire de réduction des émissions de CO_2 des voitures et véhicules commerciaux légers » COM(2007) 19 final
Proposition de règlement du Parlement européen et du Conseil établissant des normes de performance en matières d'émissions pour les voitures particulières neuves dans le cadre de l'approche intégrée de la Communauté visant à réduire les émissions de CO_2 des véhicules légers, /*COM/2007/0856 final-COD 2007/0297*/

[6] S. Catania, ADEME

Les véhicules particuliers en France

[7] J. Zeldovich

The oxidation of nitrogen in combustion and explosions, Acta Physicochimica URSS, 1946, vol. 21, pp. 577-628

[8] C. P. Fennimore

Formation of nitric oxide in premixed hydrocarbons flames, Proceedings of the Combustion Institute, 1971, vol. 13, pp.373-380

[9] B. J. Finlayson-Pitts and Jr., J. N. Pitts

Chemistry of the upper and lower atmosphere. Theory, experiments and appilcations

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[10] M. de Lange, Y. Mergler and B. Nieuwenhuys

Reduction of NO by H_2 and CO on $Pt/TiO_2/SiO_2$, Catalysis Letters, 1995, vol. 35, pp. 383-394

[11] Règlement (CE) n° 715/2007 du Parlement européen et du Conseil du 20 juin 2007 relatif à la réception des véhicules à moteur au regard des émissions des véhicules particuliers et utilitaires légers (Euro 5 et Euro 6) et aux informations sur la réparation et l'entretien des véhicules, paru au Journal Officiel L 171 du 29.6.2007, p. 1-16

[12] ADEME, EPE

Une feuille de route sur le couple véhicules particuliers-carburants à l'horizon 2050, 2007

[13] Directive 98/70/CE du Parlement européen et du Conseil du 13 octobre 1998 concernant la qualité de l'essence, parue au Journal Officiel L 350 du 28.12.1998 p. 58-68
Directive 2003/17/CE du Parlement européen et du Conseil du 3 mars 2003 concernant la qualité de l'essence, parue au Journal Officiel L 76 du 22.3.2003 p.10-19

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

CHAPITRE II : ÉTUDE BIBLIOGRAPHIQUE

Introduction 43

1. Études de composés purs 45

1.1 Oxydation des alcanes 45

a) basse température 45

b) coefficient négatif de température 47

c) mécanisme de haute température 48

1.2 Oxydation du n-décane 48

1.3 Oxydation des naphtènes 53

a) cyclohexane 54

b) alkylcyclohexanes 57

1.4 Oxydation des hydrocarbures aromatiques 58

a) oxydation du benzène 60

b) oxydation du toluène 63

c) oxydation des alkylbenzènes supérieurs 65

2. Études de mélanges 69

2.1 Mélanges d'alcanes 70

2.2 Mélanges alcane/alcène 70

2.3 Mélanges alcane/alcène/aromatique 71

3. Modélisation cinétique 75

3.1 Modélisation de l'oxydation du n-décane 76

3.2 Modélisation de l'oxydation des naphtènes 78

3.3 Modélisation de l'oxydation des aromatiques 80

Conclusion 83

Références bibliographiques 85

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

© 2009 Tous droits réservés.

http://doc.univ-lille1.fr

INTRODUCTION

Les premières études relatives aux hydrocarbures remontent au début du 20ème siècle. Aujourd'hui, l'ensemble des familles chimiques ont été expérimentalement étudiées dans un large domaine de température et de pression, mais il existe tout de même une grande disparité dans la répartition de ces études [1]. Les alcanes ont mobilisé une large majorité des études et leur mécanisme d'oxydation est désormais très bien connu. Les études sur l'oxydation des naphtènes et des aromatiques sont moins nombreuses, mais ont tout de même permis de comprendre les voies réactionnelles spécifiques associées à ces composés.

Les véritables carburants sont des mélanges de plusieurs familles d'hydrocarbures, et on s'est rapidement aperçu qu'il était utopique de vouloir représenter le comportement de ces carburants par une seule classe d'hydrocarbure. Ainsi plusieurs études de la cinétique d'oxydation des mélanges alcane/aromatique, et essentiellement le mélange heptane/isooctane/toluène, ont été publiées. Elles ont mis en évidence les effets réciproques de ces constituants sur la phénoménologie de l'oxydation.

De la même manière, la nécessité de comprendre les phénomènes d'oxydation et de les prévoir a entraîné le développement des modèles cinétiques, qui n'ont cessé d'être de plus en plus détaillés et complexes. Néanmoins ces modèles sont limités par la disponibilité des paramètres cinétiques et/ou thermodynamiques nécessaires, qu'ils soient déterminés expérimentalement ou par des méthodes de chimie quantique.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

© 2009 Tous droits réservés.

http://doc.univ-lille1.fr

1. Études de composés purs

1.1 Oxydation des alcanes

Selon la température le mécanisme mis en jeu lors de l'oxydation des alcanes est différent: aux plus basses températures, l'oxydation se déroule via un processus de peroxydation-isomérisation alors qu'aux plus hautes températures prédominent les réactions de rupture de liaison [1].

a) Basse température

Le mécanisme d'oxydation débute par l'arrachement par les molécules d'oxygène O_2 présentes dans le milieu d'un atome d'hydrogène du réactif hydrocarboné RH initial pour former des radicaux alkyles R. Rapidement cette réaction devient négligeable devant l'attaque des petits radicaux X (X=OH, H, HO_2, O) sur le réactif initial.

$$RH + O_2 \leftrightarrows R + HO_2$$
$$RH + X \leftrightarrows R + HX$$

Les radicaux alkyles formés vont ensuite venir s'additionner sur les molécules d'oxygène pour former des radicaux peroxyalkyles RO_2 qui vont réagir selon plusieurs voies:

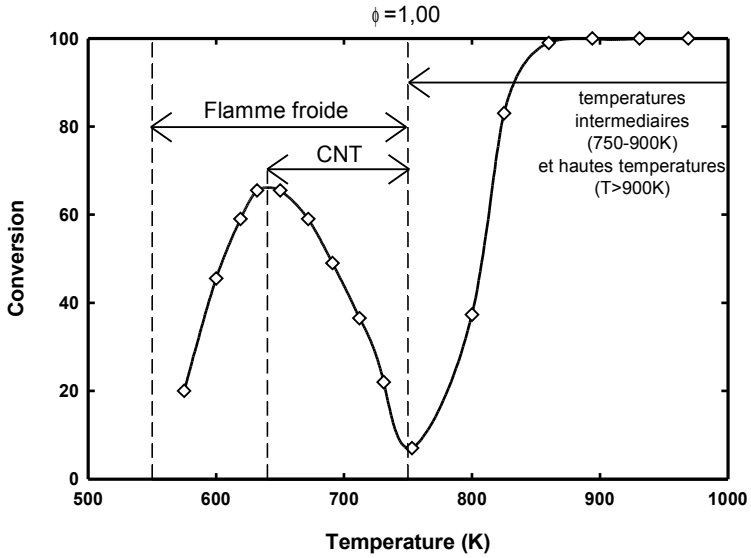


Figure II.1: Conversion du n-heptane en JSR à 10 atm: effet de la température (Ranzi *et al* [2])

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

- selon une réaction de dismutation avec un autre radical peroxyalkyle pour former des radicaux alkoxy RO et de l'oxygène

$$RO_2 + R'O_2 \rightarrow RO + R'O + O_2$$

- selon une réaction d'arrachement d'hydrogène sur une molécule R'H pour former une molécule hydroperoxyalkyle RO_2H qui se décomposera par la suite en radicaux alkoxy et hydroxyle

$$RO_2 + R'H \leftrightarrows R' + RO_2H$$
$$RO_2H \leftrightarrows RO + OH$$

- selon une réaction d'isomérisation via un état de transition cyclique formant un radical hydroperoxyalkyle QO_2H

$$RO_2 \leftrightarrows QO_2H$$

La vitesse de cette réaction d'isomérisation dépend de la taille de l'état de transition impliqué. Lors de cet état de transition, le radical peoxyalkyle adopte une structure cyclique. Ce cycle est caractérisé par une énergie de cyclisation (due aux tensions régnant dans cet état de transition) qui diminue avec la taille du cycle. Cependant l'augmentation de la taille de l'état de transition implique également celle du nombre de liaisons bloquées, et donc une diminution du facteur de fréquence. En tenant compte de ces 2 effets, il en résulte que les états de transition cycliques à 6 et 7 centres sont favorisés.

Le radical QO_2H formé va à son tour réagir de diverses manières. Il peut se décomposer et former soit un radical hydroperoxy HO_2 et une oléfine (lorsque le site radicalaire est situe en α du carbone portant le groupement hydroperoxy) soit un radical hydroxyle OH et différents produits oxygénés selon les liaisons rompues: éthers cycliques et composés carbonylés.

Cependant le radical QO_2H peut à son tour se fixer sur une molécule d'oxygène, formant ainsi des radicaux O_2QO_2H qui vont à leur tour s'isomériser et se dégrader en libérant 2 radicaux hydroxyles (en passant préalablement par la formation de cétohydroperoxydes instables à des températures modérées, 600 K). La production de ces radicaux hydroxyles va entraîner une rapide augmentation de la réactivité, de la pression et de la température correspondant à la zone de flamme froide.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

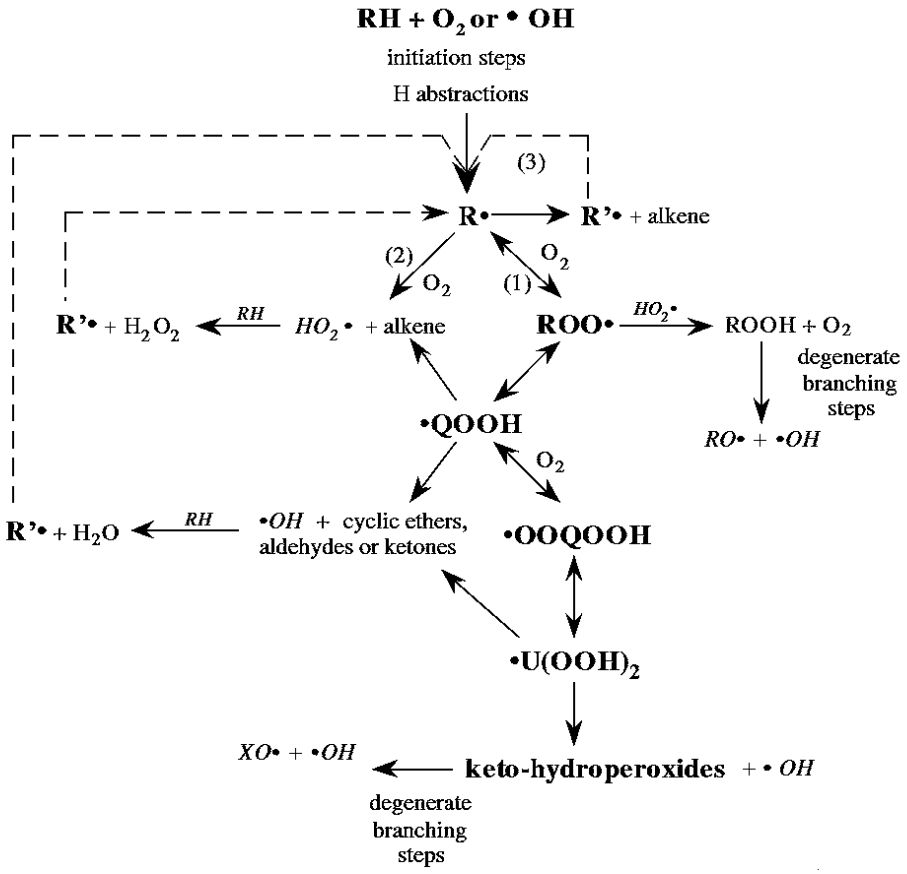


Figure II.2: Schéma simplifié du mécanisme primaire de dégradation des alcanes [3]

b) *Coefficient négatif de température*

Lorsque la température augmente au-delà de 650 K (« turn-over » temperature), on observe une baisse de la réactivité globale. La plage de température où elle est observée est appelée zone du coefficient négatif de température (CNT). Cette chute de réactivité a plusieurs raisons: dans un premier temps l'augmentation de température provoque un déplacement de l'équilibre vers les réactifs des réactions $O_2QO_2H \leftrightarrows U(O_2H)_2$, $O_2+QO_2H \leftrightarrows O_2QO_2H$ ensuite, puis $RO_2 \leftrightarrows QO_2H$ et enfin $R+O_2 \leftrightarrows RO_2$, entraînant une diminution de la production en radicaux hydroxyles et une augmentation de celle des radicaux alkyles. Ces derniers ne pouvant plus se fixer sur l'oxygène, ils vont alors être oxydés formant des radicaux hydroperoxy et des oléfines ayant une chaîne carbonée de même longueur que celle de l'hydrocarbure initial. Ces radicaux HO_2, bien moins réactifs que leurs homologues OH, entraînent une baisse de réactivité, et réagissent par une réaction de dismutation pour former du peroxyde d'hydrogène inerte à cette température qui s'accumule.

$$HO_2+HO_2 \rightarrow H_2O_2+O_2$$

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Ce n'est qu'à des températures supérieures et la décomposition consécutive de H_2O_2 en deux radicaux OH que le mécanisme de haute température va s'installer.

$$H_2O_2\ (+M) \rightarrow OH + OH\ (+M)$$

c) Mécanisme de haute température

Dans ce domaine de température, les réactions associées au système H_2/O_2 sont prépondérantes et sont responsables de l'emballement du système via l'étape de ramification $H + O_2 \leftrightarrows OH + O$. A ces hautes températures les radicaux alkyles (formés désormais uniquement par réaction radical-molécule et décomposition unimoléculaire) peuvent réagir selon 2 voies différentes dont les importances relatives dépendent des conditions thermodynamiques: selon une réaction d'oxydation (pour former l'oléfine conjuguée et un radical hydroperoxy) ou selon une réaction de décomposition par rupture C−C (formation d'une oléfine et d'un radical alkyle de taille inférieure) ou C−H (formation de l'oléfine conjuguée et d'un atome H). Aux faibles pressions, les radicaux alkyles réagissent préférentiellement selon la 2ème voie (rupture de liaison) tandis qu'aux pressions plus élevées (P>10 atm) les 2 voies interviennent et sont en compétition. Les alcènes et radicaux carbonés formés vont à leur tour subir ce mécanisme de dégradation et/ou d'oxydation jusqu'à la formation de monoxyde de carbone CO, qui sera oxydé en dioxyde de carbone CO_2 majoritairement par le radical OH selon $CO + OH \rightarrow CO_2 + H$

1.2 Oxydation du n-décane

Dagaut *et al* [4-6] ont étudié l'oxydation du n-décane entre 550 et 1150 K, à 10 atm et des richesses comprises entre 0,1 et 1,5. Dans ces conditions, une oxydation lente est observée en dessous de 750 K (caractérisée par la formation de CO, CO_2 et de composés oxygénés), tandis qu'apparaît entre 660 et 750 K une zone de coefficient négatif de température. Au-dessus de 750 K débute la chimie de haute température qui forme les produits d'oxydation traditionnels, soit des hydrocarbures insaturés. Les intermédiaires réactionnels voient leur importance varier avec la richesse mais l'éthylène reste toujours l'hydrocarbure le plus abondamment produit alors que le formaldéhyde est l'intermédiaire oxygéné majoritaire après CO. Durant la flamme froide est également observée la formation d'hétérocycles oxygénés dont les plus abondants sont les tétrahydrofuranes substitués.

Antérieurement aux travaux de Dagaut *et al*, Balès-Guéret *et al* [7] avaient eux aussi entrepris l'oxydation du n-décane en JSR mais à pression atmosphérique et sur la plage de température 873-1033 K. Les expériences furent réalisées en maintenant la température constante et en faisant varier

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

le temps de passage. Les résultats obtenus sont concordants avec ceux obtenus par Dagaut concernant les produits d'oxydation principaux: l'éthylène est l'espèce intermédiaire hydrocarbonée prédominante et le monoxyde de carbone est rapidement formé après néanmoins une période d'induction.

Les études en réacteur auto-agité ont enfin été complétées en 2006 par Dagaut *et al* [8] qui ont étudié l'oxydation du décane à pression atmosphérique et haute température. Les principales espèces détectées sont similaires à celles des études antérieures. Récemment Biet *et al* [9] ont également étudié l'oxydation en milieu stœchiométrique du n-décane en réacteur auto-agité et à pression atmosphérique. La différence principale avec les études antérieures est l'utilisation d'un temps de passage plus long (1,5 s), mais le type de résultats consiste toujours en des profils d'espèces en fonction de la température.

Outre les études menées en réacteur auto-agité, on recense dans la littérature d'autres résultats obtenus dans d'autres configurations expérimentales. Ainsi en 2000, Zeppieri *et al* [10] ont publié une étude sur la modélisation du n-décane dans laquelle sont présentés de nouveaux résultats sur la pyrolyse et l'oxydation de cet hydrocarbure en réacteur à écoulement. Ils obtiennent des profils temporels d'espèces à 1060 K pour la pyrolyse et 1019 K pour l'oxydation en condition stœchiométrique. Les résultats montrent que dans les deux expériences les espèces hydrocarbonées majoritaires sont les mêmes: éthylène, propène, butène et méthane. Quant aux espèces oxygénées, seuls sont détectés CO, CO_2 et le méthanal. A partir de ces observations les auteurs en concluent que l'oxydation du décane à haute température ne diffère en rien de celle des autres alcanes à longue chaîne, rejoignant les observations de Dagaut et Balès-Guéret.

Hormis ces études en réacteur, des expériences en tube à choc ont également été conduites. En 1996, Pfahl *et al* [11] ont mesuré les délais d'auto-inflammation de mélanges décane/air au sein d'un tube à choc chauffé (afin d'avoir accès à des concentrations en hydrocarbures plus élevées tout en évitant les problèmes de condensation). Les délais ont été caractérisés grâce à la brusque augmentation de la pression et du signal lumineux (à 431 nm, soit la transition $B^2\Sigma^- \leftarrow X^2\Pi$ de CH). Les délais ont été déterminés entre 700 et 1300 K à 13 bar et entre 700 et 1000 K à 50 bar (les délais étant trop court au-delà de 1000 K à cette pression pour être mesurable). Ils observent aux plus basses températures une auto-inflammation en deux stades associée à une zone de coefficient négatif de température.

Quatre ans plus tard Horning *et al* [12] ont mesuré les délais d'auto-inflammation de 4 alcanes, dont le n-décane, en tube à choc. Les délais, définis ici comme le temps entre le passage de

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

l'onde de choc incidente et le maximum de concentration en radicaux CH (émission à 431 nm), ont été obtenus à la stœchiométrie pour une pression de 1 atm et des températures comprises entre 1450 et 1520 K. La mise en commun de tous leurs résultats leur a permis de déterminer une expression générale du délai d'auto-inflammation τ_{inf} (µs) en fonction de la température T (K), la pression totale P (atm), la fraction molaire en oxygène X_{O2} et le nombre de carbone du réactif initial, donnant pour le décane l'expression suivante:

$$\tau_{inf}(\phi=1)=2{,}97.10^{-6}\times P^{-0{,}55}\times X_{O_2}^{-0{,}63}\times e^{\frac{46550}{RT}}$$

Plus récemment, Olchanski et Burcat [13] ont également mesuré les délais d'auto-inflammation à haute température du décane sur une large plage de richesse (0,7-3) et de pression (1-10 atm). Ces auteurs ont défini le délai comme le temps écoulé entre le saut de pression dû à l'onde de choc incidente et le début du saut de pression dû à l'inflammation. Leurs résultats leur ont également permis de corréler une expression générale liant délai d'auto-inflammation τ_{inf} (µs), température T (K) et concentration des différents constituants du mélange gazeux initial:

$$\tau_{inf}=1{,}0.10^{-12\pm0{,}2}\times[C_{10}H_{22}]^{0{,}60\pm0{,}06}\times[O_2]^{-1{,}305\pm0{,}042}\times[Ar]^{0{,}08\pm0{,}05}\times e^{\frac{34240}{RT}}$$

Ces auteurs ont également pu déterminer la composition du mélange gazeux juste avant l'auto-inflammation (soit entre 1000 et 1100 K). Les produits détectés sont CO_2, méthane, éthane, buta-1,3-diène et les 1-alcènes jusqu'à 8 carbones. Parmi ces espèces, l'éthylène est le produit majoritaire suivi par le propène et le méthane, ce qui est concordant avec l'ensemble des travaux cités précédemment. De plus les profils en fonction de la température et à concentration initiale en décane constante sont semblables d'un produit à l'autre, et se caractérise par un accroissement de la concentration avec la température.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

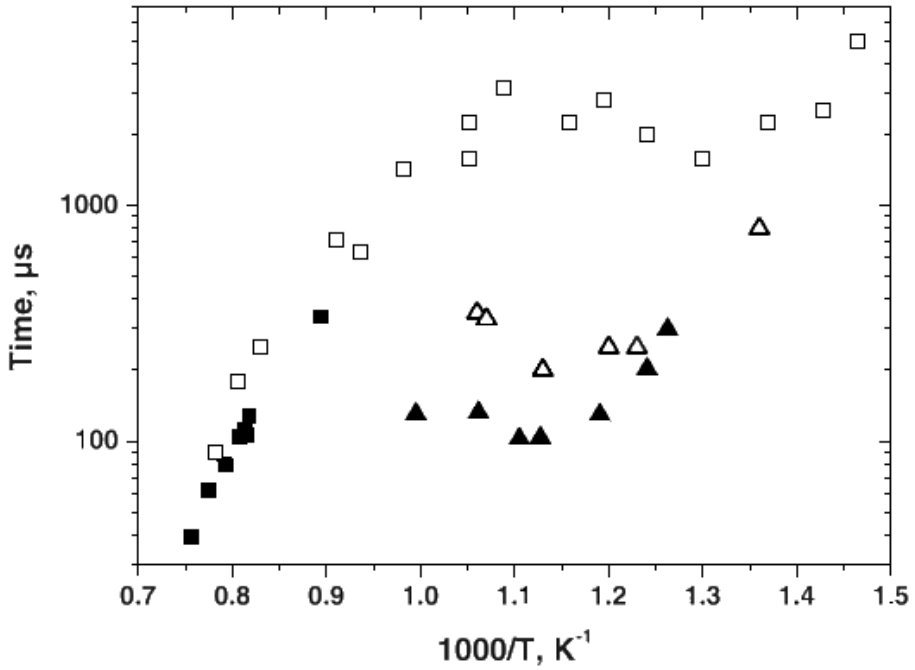


Figure II.3: Délais d'auto-inflammation de mélanges stœchiométriques n-décane/air
■: P=13 atm (Zhukov *et al* [14]); □: P=12 atm (Pfahl *et al* [11])
▲: P=13 atm (Zhukov *et al* [14]); Δ: P=12 atm (Pfahl *et al* [11])

Zhukov *et al* [14] ont également mené une étude spécifique sur l'oxydation du n-décane en tube à choc. Les délais, définis comme le temps séparant le passage de l'onde de choc incidente et le maximum du pic d'émission des radicaux OH à 309 nm (transition $A^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Pi$), ont été déterminés entre 800 et 1300 K à 13 et 80 atm pour des mélanges stœchiométriques et de richesse 0,5. Ces résultats, similaires dans leurs conditions expérimentales à ceux de Pfahl *et al*, sont cohérents avec les résultats de ces derniers dans des conditions identiques et révèlent la présence d'une zone de coefficient négatif de température entre 880 et 1000 K à 80 atm.

Une dernière étude disponible en tube à choc a été effectuée par Davidson *et al* [15]. Cette étude, complémentaire de celle de Horning *et al* [12], s'est attachée à déterminer les profils temporels des radicaux OH par absorption laser à 306,5 nm lors de l'auto-inflammation de 4 alcanes dont le décane. Les profils présentent tous la même structure: une rapide augmentation de la concentration après le passage de l'onde de choc, due à la décomposition initiale de l'hydrocarbure, aboutissant à la formation d'un plateau plus ou moins défini selon la température. Par la suite, la concentration augmente de nouveau pour atteindre un maximum et former un nouveau plateau après l'auto-inflammation.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Les derniers travaux présents dans la littérature sur l'oxydation du n-décane concernent l'étude des flammes de prémélange décane/oxygène/azote. Ainsi Wagner et Duger [16], Skjøth-Rasmussen *et al* [17], Zhao *et al* [18] puis Kumar et Sung [19] ont mesuré les vitesses de flamme du décane en fonction de la richesse. Ces équipes ont travaillé avec des configurations expérimentales et des plages de températures différentes, mais les profils déterminés sont similaires, et montrent que la vitesse de flamme laminaire est maximale pour des mélanges dont la richesse est légèrement supérieure à 1 (proche de 1,1).

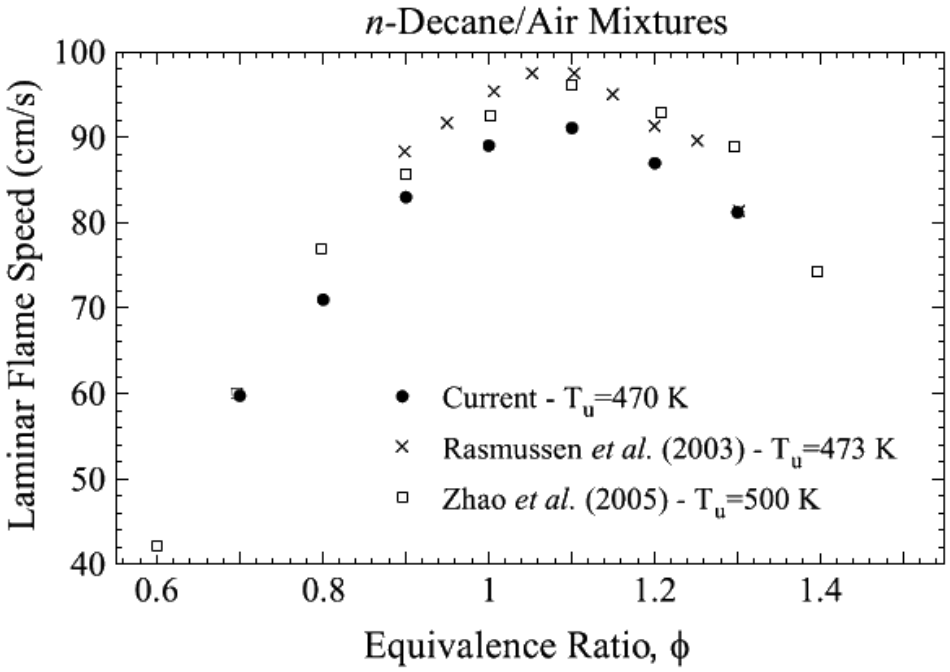


Figure II.4: Vitesses de flammes de mélanges décane/air en fonction de la richesse [19]

Delfau *et al* [20] puis Douté *et al* [21] ont déterminé la structure d'une flamme riche (φ=1,7) de prémélange stabilisée sur un brûleur à flamme plate. Les produits majoritaires détectés sont outre CO, CO_2 et H_2O les 1-alcènes, le méthane et l'éthane. Parmi les alcènes, on remarque que l'éthylène est le plus abondant suivi par le propène et que la concentration maximale pour ces espèces est rapidement atteinte et décroît ensuite très vite. Le pic de concentration de méthane est quant à lui plus éloigné du brûleur. Ce composé n'est pas consommé totalement et subsiste, avec l'acétylène, dans les gaz brûlés.

La tableau II.1 résume l'ensemble des travaux cités sur l'oxydation du n-décane.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Hydro carbure	Conditions expérimentales			réacteur	résultats	référence
	T (K)	P (bar)	φ			
décane	550-1150	10 et 40	0,1-1,5	auto-agité	profils d'espèces	Dagaut *et al* [4-6]
décane	923 et 1033	1	0,2-1,5	auto-agité	profils d'espèces	Balès-Guéret *et al* [7]
décane	900-1300	1	0,5-2,0	auto-agité	profils d'espèces	Dagaut *et al* [8]
décane	550-1100	1	1	auto-agité	profils d'espèces	Biet *et al* [9]
décane	1060	1	∞	écoulement	profils d'espèces	Zepppieri *et al* [10]
	1019	1	1			
décane	700-1300	13 et 50	0,5-2	tube à choc	délais d'auto-inflammation	Pfahl *et al* [11]
décane	1450-1550	1	1	tube à choc	délais d'auto-inflammation	Horning *et al* [12]
décane	1239-1616	1,8-10	0,7-3	tube à choc	délais d'auto-inflammation profils d'espèces	Olchanski et Burcat [13]
décane	800-1300	13 et 80	0,5 et 1	tube à choc	délais d'auto-inflammation	Zhukov *et al* [14]
décane	1357-1706	2	0,8-1,2	tube à choc	délais d'auto-inflammation profils de oh	Davidson *et al* [15]
décane	1345-1537	5-6	0,5-1,3	tube à choc	délais d'auto-inflammation	Skjøth-Rasmussen *et al* [17]
	473	1	0,8-1,3	brûleur	vitesse de flamme	
décane	300	1	1,05	brûleur	vitesse de flamme	Wagner et Duger [16]
décane	300	1	0,6-1,4	brûleur	vitesse de flamme	Zhao *et al* [18]
décane	470	1	0,7-1,3	brûleur	vitesse de flamme	Kumar et Sung [19]
décane	473	1	1,7	brûleur	structure de flamme	Delfau *et al* [20]
décane	473	1	1,7	brûleur	structure de flamme	Douté *et al* [21]

Tableau II.1: Résumé des travaux disponibles sur l'oxydation du n-décane dans la littérature

1.3 Oxydation des naphtènes

La cinétique d'oxydation des composés naphténiques n'a pas été aussi bien étudiée que celle des alcanes. Les voies réactionnelles mises en jeu sont certes pour la plupart identiques à celles des

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

composés linéaires, mais le cycle carboné induit des contraintes et des voies réactionnelles alternatives.

Les travaux présentés dans cette partie sont résumés dans le tableau II.2.

a) Cyclohexane

Les premiers travaux concernant le cyclohexane portent sur la pyrolyse de ce composé. Ce n'est que vers le milieu des années 60 que l'étude de l'oxydation du propylcyclohexane a véritablement débuté. A cette époque, Zeelenberg *et al* [22] réalisent l'oxydation du cyclohexane en réacteur statique à 260°C. Ils identifient les produits majoritaires de la réaction, essentiellement des hydrocarbures oxygénés saturés et insaturés (cyclohexanone, pentanal,...) et observent également la formation de benzène. Ils proposent alors un mécanisme réactionnel dans lequel les radicaux cyclohexyles C_6H_{11} et peroxycyclohexyles $C_6H_{11}O_2$ jouent un rôle clé. Leur décomposition via la rupture de liaisons C-C et/ou C-O explique la formation des espèces détectées. Quant au benzène, sa présence est expliquée par des déshydrogénations successives du cycle naphténique, même si le cyclohexa-1,3-diène n'est pas détecté. On peut également noter que Zeelenberg et son équipe mettent en avant la conformation spatiale des espèces réactives pour expliquer la présence en faible quantité de certains composés (exemple du 1,4-époxycyclohexane qui nécessite le passage par la forme bateau, défavorisée).

La même année Bonner et Tipper [23] obtiennent le diagramme pression-température [P, T] de la limite entre combustion lente et flamme froide d'un mélange équimolaire cyclohexane/oxygène (soit une richesse égale à 9) en réacteur statique. En outre, ils observent qu'avant la flamme froide le composé majoritairement produit est le cyclohexylhydroperoxyde $C_6H_{11}O_2H$ dont la décomposition permet d'expliquer les produits détectés et les délais de flamme froide. Le mécanisme ainsi proposé est similaire à celui de Zeelenberg, à la différence qu'il fait intervenir explicitement les réactions d'isomérisation de $C_6H_{11}O_2$.

Bennett *et al* [24] entreprennent en 1996 une étude mécanistique de l'oxydation du cyclohexane. Pour cela ils utilisent un mélange équimolaire de cyclohexane C_6H_{12} et de cyclohexane deutéré C_6D_{12} comme carburant. Les expériences sont menées dans un moteur monocyclindre à haute température (1000-1500 K). L'analyse isotopique des espèces identifiées leur permet de confirmer ce qui était jusqu'alors suspecté, à savoir que la formation du benzène découle de la déshydrogénation du cyclohexane en cyclohexène puis cyclohexa-1,3-diène, et non de

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

la recombinaison de plus petites espèces. Ces auteurs proposent à leur tour un schéma réactionnel expliquant les résultats de leur étude.

Au laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs, Marchal [25] et Voisin [26,27] étudient l'oxydation de haute température (750-1150 K) du cyclohexane en réacteur auto-agité entre 1 et 40 atm. Ils obtiennent les profils de concentration des réactifs, produits et intermédiaires principaux et identifient l'éthylène, le buta-1,3-diène et le propène comme les espèces majoritaires de la dégradation du cycle et notent également comme lors de précédentes études l'absence de hex-1-ène et la présence de benzène. Ils observent également qu'une augmentation de la pression augmente la réactivité du système avec cependant différents effets selon les produits (augmentation ou diminution e la concentration). En 2000, El Bakali *et al* [28] publient une étude expérimentale et une modélisation de l'oxydation du cyclohexane en JSR entre 1 et 10 atm. Ils constatent que les réactions de décomposition thermique revêtent une importance de moins en moins grande au fur et à mesure que la pression augmente, défavorisant ainsi la formation d'oléfines.

Des flammes méthane/oxygène/argon dopées au cyclohexane, cyclohexène et cyclohexadiène ont été étudiées par McEnally et Pfefferle [29]. Les résultats obtenus montrent que dans ces conditions de températures élevées, le cyclohexane et le cyclohexène réagissent principalement par décomposition unimoléculaire, alors que les cyclohexadiènes réagissent par déshydrogénation, formant de larges quantités de benzène. A haute température dans le cas du cyclohexane le cycle aromatique est issu de la recombinaison de plus petites espèces (C_3H_4, C_3H_3,...)

On peut enfin citer les travaux de Lemaire *et al* [30] qui ont entrepris en machine à compression rapide (MCR) entre 600 et 900 K non seulement l'oxydation du cyclohexane, mais également celle des intermédiaires de réaction menant au benzène, soit le cyclohexène et le cyclohexa-1,3-diène. Ils obtiennent le diagramme d'auto-inflammation $\tau=f(T)$ montrant le lien entre ces 3 espèces: on passe d'une inflammation en deux stades avec un coefficient négatif de température bien marqué pur le cyclohexane à une inflammation en un seul stade pour le cyclohexa-1,3-diène. Une fois de plus la voie de formation du benzène est mise en évidence et se révèle être la voie de réaction majoritaire dans les conditions opératoires utilisées au détriment de la formation de composés oxygénés.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Hydro carbure	Conditions expérimentales			réacteur	résultats	référence
	T (K)	P (bar)	φ			
cyclohexane	533	0,06-0,13	4,5-18	statique	identification espèces intermédiaires	Zeelenberg *et al* [22]
cyclohexane	503-623	0,06-0,26	9	statique	identification espèces intermédiaires	Bonner et Tipper [23]
cyclohexane (C_6H_{12} et C_6D_{12})		Taux de compression: 9,5	9	moteur mono-cylindre 1500 rpm	identification espèces intermédiaires	Bennett *et al* [24]
cyclohexane, méthyl-, éthyl-, isopropyl- et n-propylcyclo-hexane	750-1050	10 et 40	0,5-2	auto-agité	profils d'espèces	Marchal [25]
cyclohexane	750-1100	10	0,5-1,5	auto-agité	profils d'espèces	Voisin [26, 27]
cyclohexane	900-1250	1-10	0,5-1,5	auto-agité	profils d'espèces	El Bakali *et al* [28]
cyclohexane, cyclohexène et cyclohexadiène		1		flammes de méthane dopées	structure de flamme	McEnally et Pfefferle [29]
cyclohexane, cyclohexène et cyclohexadiènes	600-900	7-14	1	MCR	délais d'auto-inflammation identification espèces intermédiaires	Lemaire *et al* [30]
méthylcyclohexane	1050-1200	1	1,3 et ∞	à écoulement	profils d'espèces	Zeppieri *et al* [31]
n-propylcyclo-hexane	923 et 1033	1	0,2-1,5	auto-agité	profils d'espèces	Balès-Guéret *et al* [7]
n-propylcyclo-hexane	950-1250	1	0,5-1,5	auto-agité	profils d'espèces	Ristori [32, 33]
n-propylcyclo-hexane	800-1200	10	0,5-2,0	auto-agité	profils d'espèces	Mati [34]
méthylcyclohexane	1200-2100	1-4	0,5-2	tube à choc	délais d'auto-inflammation	Orme *et al* [35]
méthylcyclohexane	680-980	10-20	1	mcr	délais d'auto-inflammation	Pitz *et al* [36]
diméthyl-, vinyl-, ethylidène- et éthynyl-cyclohexane		1		flammes de méthane dopées	structure de flamme	McEnally et Pfefferle [34]

Tableau II.2: Résumé des travaux disponibles sur l'oxydation des hydrocarbures naphténiques dans la littérature

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

b) Alkylcyclohexanes

Si les études sur l'oxydation du cyclohexane sont nombreuses, celles portant sur l'oxydation des alkylcyclohexanes le sont beaucoup moins. On peut néanmoins citer les travaux de Zeppieri *et al* [31] sur la pyrolyse et l'oxydation du méthylcyclohexane à haute température (1050-1200 K) en réacteur à écoulement. Dans les deux conditions opératoires utilisées (en présence et absence d'oxygène) les espèces intermédiaires sont identiques (éthylène, buta-1,3-diène, méthane et propène pour les espèces majoritaires) mais la consommation du réactif initial est plus rapide lors de l'oxydation. De plus la présence d'oxygène ne modifie pas les voies de consommation des radicaux méthylcyclohexyles formés, qui sont dégradés par rupture homolytique de liaisons C−C principalement.

En 1992 Balès-Guéret *et al* [7] étudient l'oxydation du n-propylcyclohexane en JSR entre 873 et 1033 K sous une pression de 1 atm et obtiennent les profils temporels de nombreuses espèces (éthylène, propène, méthane, buta-1,3-diène,...). Dans le même laboratoire, Marchal [24] a étudié l'oxydation en milieu stœchiométrique de plusieurs alkylcyclohexanes (méthyl-, éthyl-, propyl- et isopropyl-cyclohexane) à 10 atm et obtenu les profils de concentration des espèces majoritaires. Les résultats montrent que les produits d'oxydation de ces molécules sont identiques à ceux du cyclohexane avec néanmoins la présence de molécules spécifiques tels les alkénylcyclohexanes et les alkylbenzènes. Ces travaux ont ensuite été complétés par Ristori [32, 33] puis Mati [34] qui se sont tous deux intéressés au n-propylcyclohexane. Ils ont obtenu le même type de données expérimentales (profils de concentration en fonction de la température) et proposé des mécanismes cinétiques détaillés expliquant et reproduisant leurs résultats.

En 2006, Orme *et al* [35] ont mesuré les délais d'auto-inflammation (définis à partir du pic d'émission des radicaux CH à 431 nm) du méthylcyclohexane en tube à choc, entre 1250 et 2100 K, pour des pressions allant de 1 à 4 bar et des richesses de 0,5 à 2. Ils observent un effet de la pression et de la richesse identique à celui des autres hydrocarbures, à savoir une diminution des délais avec l'augmentation de la pression et de la concentration en oxygène. Un an plus tard, Pitz *et al* [36] publient une étude en machine à compression rapide concernant les délais d'auto-inflammation du même composé. Les expériences sont menées entre 680 et 980 K sur des mélanges stœchiométriques méthylcyclohexane/oxygène/diluant à des pressions de 10, 15 et 20 atm. Les résultats montrent qu'il existe d'une part un coefficient négatif de température intense localisé entre 750 et 850 K et que l'augmentation de la pression s'accompagne d'une diminution des délais.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

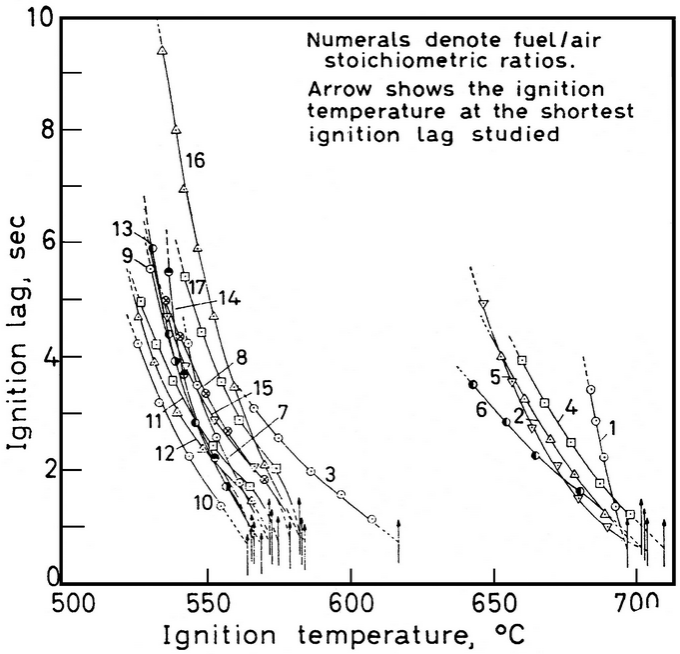
McEnally et Pfefferle [37] ont étudié la structure de flammes non prémélangées méthane/oxygène/azote dopées avec différents alkycyclohexanes et alkenylcyclohexanes. L'analyse des structures de flammes obtenues montre que dans ces conditions de température, les hydrocarbures cycliques sont consommés majoritairement par décomposition unimoléculaire entraînant la disparition de la structure cyclique et que les espèces aromatiques alors observées viennent de la recombinaison de molécules de tailles plus modeste issues de la dégradation du réactif initial.

1.4 Oxydation des hydrocarbures aromatiques

Présents en quantité importante dans les carburants les composés aromatiques ont fait l'objet de nombreuses études, conséquence de leur. Leurs mécanismes chimie d'oxydation sont aujourd'hui relativement bien connus grâce aux nombreux travaux concernant le benzène et le toluène qui sont les hydrocarbures aromatiques les plus étudiés.

Les premières études sur l'oxydation des aromatiques sont dues à Burgoyne [38,39] qui a entre 1937 et 1939 étudié l'oxydation du benzène, du toluène, de l'éthylbenzène, du propylbenzène, du butylbenzène, des xylènes et du 1,3,5-triméthylbenzène en réacteur statique à basse pression (100 torr) entre 689 et 833 K. A partir de mélanges équimolaires hydrocarbure/oxygène (donc avec des richesses élevées supérieures à 9), il a pu estimer les énergies d'activation associées aux processus d'oxydation dans ces conditions et a constaté que la présence d'une chaîne carbonée latérale facilite la réaction d'oxydation, et ce d'autant plus que la chaîne est longue. La plurisubstitution du noyau a aussi un effet promoteur sur l'oxydation, qui dépend néanmoins de la disposition des groupements, la substitution en para étant la moins favorable. Burgoyne a également observé la présence d'un coefficient négatif de température lors de l'oxydation du butylbenzène entre 573 et 673 K.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr



Ignition lag/temperature relationships for twice stoichiometric hydrocarbon-air mixtures of 1 benzene, 2 toluene, 3 o-xylene, 4 m-xylene, 5 p-xylene, 6 mesitylene (1,3,5-trimethylbenzene), 7 ethylbenzene, 8 n-propylbenzene, 9 iso-propylbenzene, 10 o-cymene (2-isopropyltoluene), 11 m-cymene (3-isopropyltoluene), 12 p-cymene (4-isopropyltoluene), 13 n-butylbenzene, 14 s-butylbenzene, 15 iso-butylbenzene, 16 t-butylbenzene and 17 t-butyltoluene

Figure II.5: Délais d'auto-inflammation des composés aromatique [40]

En 1965, Salooja [40] a étudié l'auto-inflammation de 17 hydrocarbures aromatiques en réacteur à écoulement entre 450 et 750°C. L'analyse des résultats lui a permis d'établir des corrélations entre structure et réactivité: la présence d'atomes de carbone secondaires couplée à une longue chaîne alkyle favorise l'auto-inflammation, rejoignant les conclusions faites par Burgoyne. Elle a ainsi pu classer les aromatiques en deux groupes: ceux qui s'enflamment difficilement, au-delà de 700°C dans ces conditions (benzène, toluène, m- et p-xylène, 1,3,5-triméthylbenzène), et ceux s'enflammant plus facilement, aux alentours de 550-600°C (propylbenzènes, butylbenzènes,...). Cette classification en 2 groupes a également été observée en 2001 par Roubaud *et al* [41] qui ont étudié en machine à compression rapide l'auto-inflammation de 11 molécules aromatiques et obtenu les délais d'auto-inflammation en milieu stœchiométrique de ces espèces entre 600 et 900 K. Ils ont soulevé l'importance de la position des substituants sur le cycle, la

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

substitution en ortho favorisant la réactivité (cas de l'o-xylène qui à 900 K s'auto-enflamme sous une pression de 7,5 bar contre 20 bar pour les m- et p-xylènes).

L'intégralité des travaux présentés dans cette partie est résumée dans le tableau II.3.

a) Oxydation du benzène

Venkat *et al* [42] étudient en 1982 l'oxydation du benzène et du toluène en réacteur à écoulement à 1200 K et pression atmosphérique. Ils obtiennent les profils temporels d'une dizaine d'espèces, ce qui leur permet de proposer un mécanisme de dégradation du noyau aromatique qui depuis n'a pas été fondamentalement remis en cause et est représenté sur la figure II.6. Dans ce mécanisme la dégradation du benzène se fait selon la chaîne réactionnelle suivante: benzène → radical phényl → radical phénoxy → radical cyclopentadiényle → radical cyclopentadiénoxy → radical butadiényle. Dans ce mécanisme la perte d'un atome de carbone par les différents cycles se fait par le départ d'une molécule de CO. Ces travaux et ce mécanisme seront repris en 1986 par Brezinsky [43] synthèse sur l'oxydation des aromatiques.

Bermudez et Pfefferle [44] publient en 1995 une étude sur l'oxydation du benzène (φ=0,19 et P=350 torrs) en micro-réacteur (équivalent à un réacteur parfaitement agité) entre 800 et 1200 K. Des mesures par prélèvement puis analyse par spectrométrie de masse (quadripolaire et à temps de vol) leur permettent d'obtenir les profils de concentration en fonction de la température des espèces stables mais aussi des espèces radicalaires hydrocarbonées. Les résultats apparaissent comme consistants avec les premières étapes du mécanisme proposé par Venkat *et al*. Avec le même dispositif expérimental Chai et Pfefferle [45] étudient de nouveau l'oxydation du benzène mais dans des conditions expérimentales différentes (900-1300 K, 350 torr, φ =0,19 et 1,02). Une fois de plus ils obtiennent les profils des espèces stables et radicalaires, confirmant à nouveau le mécanisme de Venkat (observation de C_5H_5, C_5H_5O et C_6H_5O comme espèces radicalaires principales).

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

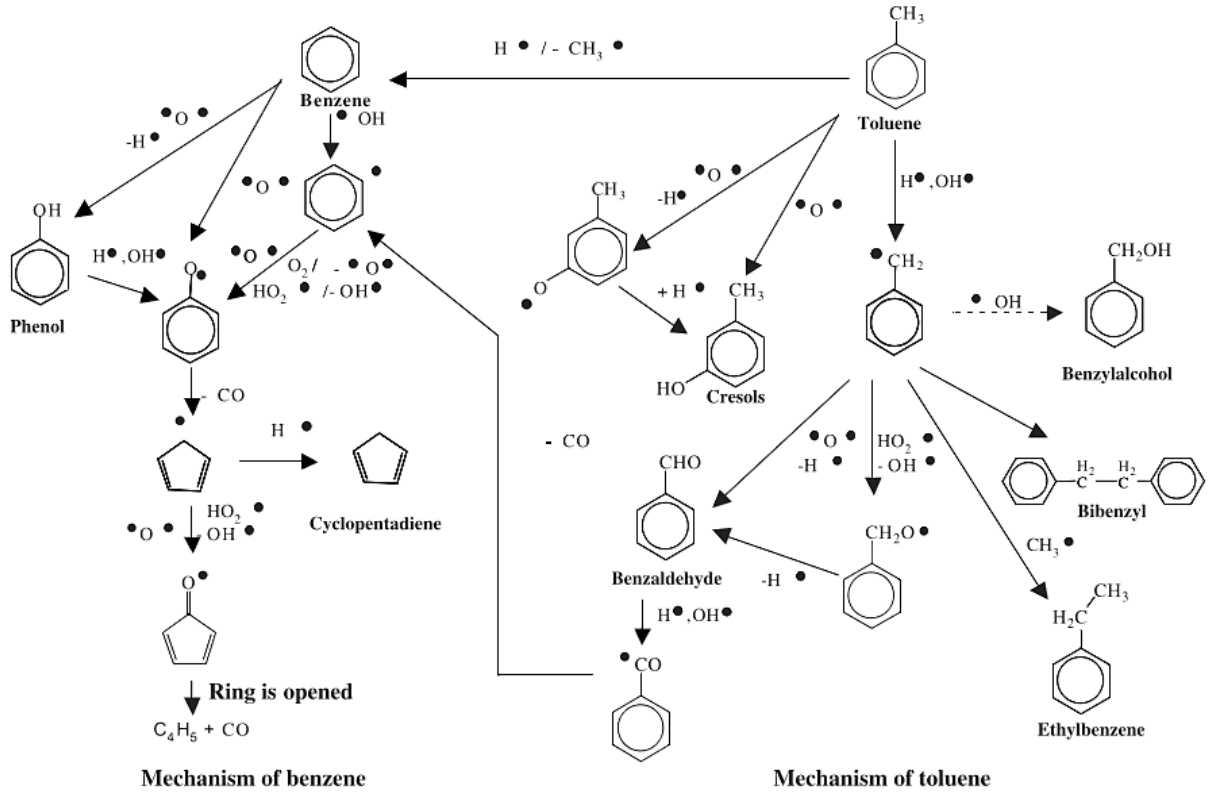


Figure II.6: Mécanisme de dégradation du benzène et du toluène [2]

Au LCSR, Marchal [25] puis Ristori [32, 46] ont étudié l'oxydation du benzène en réacteur auto-agité (JSR) dans de nombreuses conditions (1≤P(atm)≤10; 950≤T(K)≤1300; 0,3≤φ≤2). Ils ont obtenu les profils de fraction molaire en fonction de la température d'une vingtaine d'espèces, dont les principales sont l'acétylène, le phénol, le formaldéhyde, l'éthylène et le vinylacétylène. Ils ont ainsi pu constater que le benzène était consommé tardivement (T>1050 K) mais qu'il disparaissait ensuite rapidement. Ils ont également observé qu'à plus haute pression la vitesse d'oxydation de l'hydrocarbure initial est plus élevée et que les voies de dégradation du benzène semblent différentes. En effet la concentration du 1,3-cyclopentadiène diminuait lorsque la pression augmentait laissant supposer que la voie de décomposition via cette espèce devenait négligeable au profit de la décomposition du radical phényl en acétylène et radical but-1-èn-3-yn-1-yle (n-C4H3).

Une autre étude menée par Pengloan [47] dans le même laboratoire a couplé la détermination des profils d'espèces en JSR (1000-1360 K, 1 atm, φ=0,5-1,5) et la mesure des délais d'auto-inflammation en tube à choc (1200-2000 K, 1,4-18 atm, 0,5< φ<1,5). Les produits détectés en JSR s'accordent avec les résultats des études antérieures. En 2001, Da Costa [48] a mené une étude

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

similaire en JSR (923-933 K) et tube à choc (1230-1970 K) et les résultats s'accordent avec les étude précédentes.

Fieweger *et al* [49] ont également étudié l'oxydation en tube à choc du benzène, à des pressions de 13 et 39 bar et des richesse de 0,5, 1 et 1,5. Les résultats obtenus entre 800 et 1300 K montre que les délais diminuent de manière monotone avec la température, et que les mélanges riche et stœchiométrique présentent sensiblement le même comportement.

Plus récemment, Mittal *et al* [50] ont eux aussi déterminé les délais d'auto-inflammation de mélanges benzène/oxygène/diluant en machine à compression rapide entre 920 et 1100 K et pour une pression de 45 bar. Comme Fieweger *et al*, [49] ils constatent une décroissance monotone des délais avec la température selon une loi de type Arrhénius. Une analyse par régression leur permet de déterminer dans leurs conditions une relation liant délai d'auto-inflammation, température et fraction molaire initiale en oxygène.

Outre des études en tube à choc et réacteurs, des flammes de benzène ont également été étudiées. On peut à ce titre citer les travaux de Bittner et Howard [51] qui ont déterminé la structure (une cinquantaine d'espèces détectées) d'une flamme plate riche (φ=1,8) prémélangée à basse pression (2670 Pa = 20 torrs). Ils ont mesuré les HAP (Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques) et ont proposé un mécanisme expliquant leur formation par addition successive puis cyclisation de radicaux éthynyle, vinylacétylènyle et méthyle. De leur côté, Davis *et al* [52] ont mesuré les vitesses de flamme du benzène en fonction de la richesse à pression atmosphérique.

Une autre étude a été menée à Lille par Dupont *et al* [53] sur l'oxydation d'une flamme plate laminaire et stœchiométrique de méthane dopée avec du benzène stabilisée à basse pression (5330 Pa= 40 torrs). Le couplage analyse par faisceau moléculaire-spectrométrie de masse et prélèvement-chromatographie en phase gazeuse a permis d'obtenir les profils en fonction de la distance au brûleur à la fois des espèces moléculaires mais également des espèces radicalaires. La simulation de leurs résultats au moyen d'un mécanisme cinétique a permis de mettre en évidence les voies principales de consommation du benzène dans ces conditions ainsi que celles des intermédiaires de réaction.

Une récente étude de Schöbel-Ostertag *et al* [54] s'est intéressée à l'oxydation du benzène dans des conditions proches de celles rencontrées dans les incinérateurs d'ordure ménagères (excès d'air, basse température 850-960 K, pression atmosphérique et long temps de séjour). Pour ce faire ils ont utilisé un réacteur particulier couplant un brûleur (pour la production de gaz brûlés à partir

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

du méthane) et un réacteur à écoulement reliés par une zone de mélange dans laquelle le benzène est injecté au sein des gaz de combustion (CO_2, CO,...). Ils ont obtenu les profils d'espèces en fonction du temps de séjour, montrant que le phénol est l'intermédiaire principal et le formaldéhyde l'intermédiaire prépondérant mis à part CO. En étudiant l'influence de la richesse à température constante, ils observent que le maximum de conversion du benzène est obtenu pour une richesse de 0,5 quelle que soit la température considérée, ce qu'ils expliquent par la formation pour des richesses plus faibles de radicaux HO_2 relativement stable dans les conditions expérimentales utilisées, appauvrissant alors le milieu réactionnel en radicaux très réactifs et diminuant par conséquent la réactivité.

b) Oxydation du toluène

En 1965 Barnard et Ibberson exposent à travers deux publications [55,56] leurs résultats sur l'oxydation du toluène en réacteur statique entre 450 et 515°C. Dans un premier temps ils déterminent les ordres de réaction par rapport à l'oxygène (n=2) et au toluène (n=1) ainsi que l'énergie d'activation de la réaction (E_{act}=48500 cal/mol=202900 J/mol). Ils ont également déterminé les intermédiaires principaux (H_2, méthane, acétylène, benzène, acide benzoïque, benzaldéhyde) et suspectent la présence de quinones (cyclohexadiènedione). Ils notent également que la période d'induction de la réaction peut être réduite voire supprimée par l'ajout de formaldéhyde ou de benzaldéhyde.

Venkat *et al* [42], lors de leur étude sur le benzène, ont également réalisé des expériences sur l'oxydation du toluène en réacteur à écoulement dans les conditions suivantes: T≈1250 K et 0,75≤φ≤1,48. Ils ont obtenu en fonction du temps les profils de concentration d'environ 15 espèces, et ont remarqué de grandes similitudes entre l'oxydation du benzène et du toluène (concentration des intermédiaires). Ces auteurs proposent alors deux voies de réaction pour expliquer ces résultats: soit un hydrogène est arraché au groupement méthyle pour former après oxydation (addition de O, OH, O_2) l'alcool benzylique ou le benzaldéhyde, soit le groupement méthyle est substitué par un atome d'hydrogène du milieu réactif formant ainsi le benzène. Ensuite ces composés nouvellement formés sont dégradés en radical phényl qui se décompose selon les voies indiquées pour le benzène.

Deux ans plus tard, cette équipe publie une autre étude [57] sur l'oxydation du toluène (T=1180 K, φ=0,63 et 1,4), s'intéressant plus particulièrement à la réactivité du groupement méthyle. L'analyse des profils d'espèces montre que les réactions radical-radical et radical-atome jouent un rôle important dans la formation du benzaldéhyde et de l'alcool benzylique à partir du radical benzyle.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

$$C_6H_5CH_2+O \rightarrow C_6H_5CHO+H$$
$$C_6H_5CH_2+HO_2 \rightarrow (C_6H_5CH_2O+OH) \rightarrow C_6H_5CHO+OH+H$$
$$C_6H_5CH_2+OH(+M) \rightarrow C_6H_5CH_2OH(+M)$$

L'importance de ces réactions montre que l'oxydation du toluène est non représentative des alkylaromatiques à plus longue chaîne, ce qui s'explique par l'absence de réaction de β-scission possible et la grande stabilité des radicaux benzyles.

Au LCSR, Marchal [25] puis Dagaut *et al* [58] ont étudié l'oxydation du toluène en JSR à 1 et 10 atm pour 3 richesses (0,5, 1 et 1,5). Ils ont obtenu les profils de concentration en fonction de la température des principales espèces et ont observé qu'à quelques exceptions près les intermédiaires détectés étaient les mêmes que lors de l'oxydation du benzène, mais que ce dernier était dans des conditions identiques plus réactif. Leurs conclusions sur le mécanisme de dégradation sont en accord avec les travaux de l'équipe de Princeton et le passage par les radicaux benzyle et phényl.

Pengloan [47] et Da Costa [48] ont mesuré les délais d'auto-inflammation du toluène en tube à choc (1400-2000 K, 1,45 atm, $0,5 \leq \varphi \leq 1,5$) en suivant l'émission du radical OH dans l'ultraviolet (306 nm). Pengloan a ainsi pu déterminer une relation permettant d'estimer, dans ses conditions, le délai d'auto-inflammation en fonction de la température et des concentration en réactifs initiaux.

Précédemment, Burcat *et al* [59] avaient en 1979 mesuré les délais d'auto-inflammation de mélange stœchiométrique toluène/oxygène/argon en tube à choc entre 1424 et 1643 K et une pression de 4 atm. A partir de ces valeurs, ils ont pu déterminer une valeur de l'énergie d'activation apparente de 31800 cal/mol.

En 2004 Sivaramakrishnan *et al* [60] ont étudié l'oxydation du toluène en tube à choc à haute température (1210-1480 K) et haute pression (22-550 bar). Les mélanges étudiés avaient une richesse égale à 1 et 5, et ont permis de déterminer l'évolution de la concentration des produits d'oxydation en fonction de la température. Les produits majoritairement observés sont le benzène, CO et CO_2, auxquels s'ajoute C_2H_2 et C_2H_4 aux plus faibles pressions. En milieu riche la formation d'hydrocarbures lourds a également été observée.

L'année d'après Vasudevan *et al* [61] ont à leur tour étudié l'oxydation du toluène en tube à choc entre 1400 et 2000 K, 1,5 et 5 atm. Ils ont mesuré les délais d'auto-inflammation des mélanges étudiés (richesse de 0,5 à 1,875) et déterminé une expression liant le délai d'auto-inflammation à la pression, la température, la richesse et la fraction molaire en oxygène. A partir de mesures d'absorption du radical OH à 306,7 nm, les auteurs ont pu extraire après calibration les profils

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

temporels de concentration de ce radical durant le phénomène d'oxydation. La même année Davidson *et al* [62] publient également un article dans lequel ils présentent les délais d'auto-inflammation de mélanges toluène/air mesurés en tube à choc. Les températures inspectées (865-1269 K) sont plus faibles que celles considérées par Vasudevan *et al*, mais les expériences ont été menées à plus haute pression (14-59 atm).

Les délais d'auto-inflammation des mélanges toluène/oxygène ont également été mesurés par Griffiths *et al* [63] en machine à compression rapide entre 7 et 10 atm. Ils observent que le toluène ne s'enflamme pas en dessous de 850 K, mais qu'au-delà de cette température, les délais décroissent rapidement et ne sont vite plus mesurables. Ces résultats montrent, selon les auteurs, que l'auto-inflammation du toluène est dominée par des processus de décomposition et que les processus de ramification ont un rôle mineur.

Pour finir, il existe également des résultats concernant l'oxydation du toluène obtenu en flamme. En 1987, Hamins et Seshadri [64] ont déterminé la structure d'une flamme de diffusion à contre-courant stabilisée, et une production importante de suies a été observée dans la zone riche en toluène. Davis *et al* [52] puis Hirasawa *et al* [65] ont déterminé les vitesses de flamme laminaire de mélange toluène/air en fonction de la richesse et obtiennent des résultats en très bon accord. La vitesse maximale est obtenue pour une richesse de 1,1 ce qui est concordant avec les observations faites pour les autres hydrocarbures.

c) Oxydation des alkylbenzènes supérieurs

En 1982 Venkat *et al* [42] publient en même temps que leurs travaux sur le benzène et le toluène une étude sur l'oxydation de l'éthylbenzène en réacteur piston (T=1118 et 1164 K, φ=0,49 et 0,79). Ces travaux sont complétés en 1986 par la publication de 4 études émanant de la même équipe sur l'éthylbenzène [66], le n-propylbenzène [67], l'isopropylbenzène [68], et le n-butylbenzène [69]. Dans toutes ces études le styrène, le toluène, le benzène, le benzaldéhyde et le phénol sont observés comme produits majoritaires. Des espèces provenant de la décomposition du noyau aromatique sont également détectées. Les auteurs suggèrent alors que l'oxydation des alkylbenzènes à haute température se fait via les 3 voies principales ci-dessous par ordre d'importance décroissante (dans les conditions du réacteur à écoulement):

- rupture thermique d'une liaison C-C de la chaîne alkyle formant deux radicaux hydrocarbonés dont un benzylique stabilisé par résonance (la rupture de la liaison

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

C_6H_5-R n'est pas favorisée contrairement à celle liant le carbone benzylique et le reste de la chaîne alkyle)

- ✗ déplacement de la chaîne latérale par un atome ou radical (H le plus souvent)
- ✗ arrachement d'un hydrogène du groupe alkyle par un radical (H, O, OH principalement) formant un radical arylalkyle ; compte-tenu des énergies de liaisons, l'arrachement d'un hydrogène en position benzylique est favorisé.

Tous les radicaux carbonés produits par ces 3 voies sont ensuite oxydés ou réagissent par β-scission ou perte d'un hydrogène. Cependant lors de l'oxydation du n-propylbenzène, le propène et le β-méthylstyrène ne sont pas observés alors que le schéma décrit précédemment prévoit leur formation à partir de la décomposition du radical 1-phényl-2-propyle. En se basant sur d'autres études, Litzinger *et al* [65] montrent que les radicaux 1-phényl-2-propyle s'isomérisent en radicaux 2-phényl-1-propyle par transfert interne 1-2 du groupement phényl (figure II.7). Cette réaction qui passe par un état de transition cyclique à 3 centres est suivie par la perte d'un groupe méthyle formant le styrène. Cette réaction de transfert est applicable à tous les radicaux 1-phényl-2-alkyle comme ceux dérivant du butylbenzène.

Figure II.7: Isomérisation du radical 1-phényl-2-propyle en radical 2-phényl-1-propyle par transfert interne 1-2 du groupement phényl [65]

L'oxydation des alkylaromatiques passe donc préférentiellement par l'oxydation de la chaîne alkyle, permettant de faire le rapprochement entre l'alkylaromatique et l'alcane correspondant vis-à-vis des intermédiaires et voies de réaction.

Au LCSR de nombreuses études ont été menées sur l'oxydation des alkylaromatiques en réacteur auto-agité et en tube à choc. Pengloan [47] a obtenu les profils de concentration des espèces intermédiaires d'oxydation de l'éthylbenzène entre 1000 et 1400 K à 1 atm en réacteur ainsi que les délais d'auto-inflammation entre 1400 et 2000 K à 1,4 atm. Ristori [32] puis Mati [34] ont quant à eux obtenu les mêmes données concernant l'oxydation du n-propylbenzène en JSR entre 900 et 1200 K, à 1 et 10 atm respectivement. Marchal [25] a obtenu pour une même plage de température de tels résultats pour l'oxydation du propylbenzène et de l'isopropylbenzène. Toutes ces

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

études sont concordantes avec les hypothèses émises par l'équipe de Princeton et présentées ci-dessus. De plus l'isomérisation des radicaux par transfert du groupement phényl a été mise en évidence (faible quantité de propène détecté) lors d'une étude de Dagaut *et al* [70] sur l'oxydation du propylbenzène.

En 2002, Scott *et al* [71,72] ont entrepris en même temps que leur étude sur le toluène l'oxydation de l'éthylbenzène en mélange avec $H_2/O_2/N_2$ à 773 K. Outre l'obtention des constantes de vitesse de cet hydrocarbure avec H et HO_2, ils ont montré que les réactions radical-radical avait une grande importance dans ces conditions, notamment la chaîne de réaction $C_6H_5CHCH_2 + HO_2 \rightarrow C_6H_5CHO + CH_2O + OH$

Roubaud *et al* ont publié 3 études [41,73,74] de l'oxydation de basse température (600-900 K) des alkylaromatiques en MCR (φ=1). Leurs travaux se sont plus particulièrement concentrés sur le n-butylbenzène. Ils ont obtenu pour cette espèce les délais d'auto-inflammation et identifié les espèces formées (au nombre d'une quarantaine) avant l'auto-inflammation. Le butylbenzène a révélé un comportement classique de l'oxydation des alcanes, à savoir une inflammation en 2 stades avec la présence d'un coefficient négatif de température entre 750 et 850 K. Parmi les espèces identifiées, les intermédiaires majoritaires sont le benzaldéhyde, le styrène, les buténylbenzènes et d'autres espèces non aromatiques (formaldéhyde, acétaldéhyde). Des hétérocycles oxygénés ayant conservé la structure initiale de l'hydrocarbure ont également été détectés, montrant ainsi que l'oxydation de basse température du butylbenzène est analogue à celle des alcanes à longue chaîne (arrachement de H, addition sur O_2, isomérisation, rupture de liaisons O-O, C-O et/ou C-C).

En 2006, Ergut *et al* [75] ont étudié une flamme riche (φ=2,5) de prémélange d'éthylbenzène stabilisée sur un brûleur à flamme plate. La structure de cette flamme a été déterminée, et une trentaine de HAP ont été identifiés et la formation de suies a été visualisée (flamme intense de couleur jaune). Ils ont aussi pu estimer la vitesse de flamme dans ces conditions à 36 cm/s.

Hydro carbure	**Conditions expérimentales**			**réacteur**	**résultats**	**référence**
	T (K)	**P (bar)**	**φ**			
benzène, alkylbenzènes	685-833	0,13		statique	énergie d'activation	Burgoyne [38, 39]
17 hydrocarbures aromatiques	723-973		1		délais d'auto-inflammation	Salooja [40]

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Hydro carbure	Conditions expérimentales			réacteur	résultats	référence
	T (K)	P (bar)	φ			
11 hydrocarbures aromatiques	600-900		1	MCR	délais d'auto-inflammation	Roubaud *et al* [29]
benzène, toluène, éthylbenzène	≈1200	1		à écoulement	profils d'espèces	Venkat *et al* [42]
hydrocarbures aromatiques					résumé de travaux antérieurs	Brezinsky [43]
benzène	850-960	1	0,05-2	à écoulement	profils d'espèces	Schöbel-Ostertag *et al* [54]
benzène	800-1200	0,46	0,19	micro-réacteur parfaitement agité	profils d'espèces	Bermudez et Pfefferle [44]
benzène	900-1300	1	0,19 et 1,02	micro-réacteur parfaitement agité	profils d'espèces	Chai et Pfefferle [45]
benzène	800-1300	13-39	0,5-1,5	tube à choc	délais d'auto-inflammation	Fieweger *et al* [49]
benzène, toluène	920-1100	45	0,5-1	MCR	délais d'auto-inflammation	Mittal *et al* [50]
benzène, toluène, n-propyl- et iso-propylbenzène	900-1150	10	1	auto-agité	profils d'espèces	Marchal [25]
benzène et n-propylbenzène	900-1200	1	0,5-1,5	auto-agité	profils d'espèces	Ristori [32, 46]
benzène, toluène, éthylbenzène	950-1400	1	0,5-1,5	auto-agité	profils d'espèces	Pengloan [47]
	1300-2000	1-20	0,5-1,5	tube à choc	délais d'auto-inflammation	
Benzène, toluène	923-933	1	0,5-1,5	auto-agité	profils d'espèces	Da Costa [48]
	1230-1970	1-20	0,5-1,5	tube à choc	délais d'auto-inflammation	
benzène		0,026	1,8	brûleur	structure de flamme	Bittner et Howard [51]
benzène, toluène			0,5-1,4	brûleur	vitesses de flamme	Davis *et al* [52]
benzène		0,052	1	flamme de méthane dopée	structure de flamme	Dupont *et al* [40]
toluène				statique	identification des espèces intermédiaires	Barnard et Ibberson [55, 56]

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Hydro carbure	Conditions expérimentales			réacteur	résultats	référence
	T (K)	P (bar)	φ			
toluène	1180	1	0,63 et 1,4	à écoulement	profils d'espèces	Brezinsky *et al* [57]
toluène	900-1200	10	0,5-1,5	auto-agité	profils d'espèces	Dagaut *et al* [58]
toluène	1250-1450	22-550	1 et 5	tube à choc	profils d'espèces	Sivaramakrishnan *et al* [60]
toluène	1424-1643	4	1	tube à choc	délais d'auto-inflammation	Burcat *et al* [59]
Toluène	1400-2000	1,5 et 5	0,5-1,875	tube à choc	délais d'auto-inflammation	Vasudevan *et al* [61]
Toluène	865-1269	14-59		tube à choc	délais d'auto-inflammation	Davidson *et al* [62]
toluène	600-950	7-10	1	MCR	délais d'auto-inflammation	Griffiths *et al* [63]
toluène		1		brûleur	structure de flamme	Hammins et Sedhari [64]
toluène		1	0,7-1,3	brûleur	vitesses de flamme	Hirasawa *et al* [65]
toluène, éthylbenzène	773	0,66		fermé	profils d'espèces constantes de vitesse	Scott *et al* [71, 72°
éthylbenzène	1060	1	0,56-1,30	à écoulement	profils d'espèces	Litzinger *et al* [66]
n-propylbenzène	1060	1	0,65-1,50	à écoulement	profils d'espèces	Litzinger *et al* [67]
isopropyl-benzène	1000-1070	1	0,5-1,5	à écoulement	profils d'espèces	Litzinger *et al* [68]
n-butylbenzène	1069	1	0,98	à écoulement	profils d'espèces	Brezinsky *et al* [69]
n-propylbenzène	800-1200	10	0,5-2,0	auto-agité	profils d'espèces	Mati [34]
o-xylène, o-éthyltoluène, n-butylbenzène	600-900	14-19	1	MCR	délais d'auto-inflammation	Roubaud *et al* [41, 73, 74]
éthylbenzène		1	2,5	brûleur	structure de flamme	Ergut *et al* [75]

Tableau II.3: Résumé (non exhaustif) des travaux disponibles sur l'oxydation des hydrocarbures aromatiques dans la littérature

2. Études de mélanges

Si la compréhension des mécanismes d'oxydation d'une espèce passe par son étude approfondie en l'absence d'autres hydrocarbures, il n'en est pas de même lorsque l'on s'intéresse aux

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

carburants réels. Ainsi les premières études ont essentiellement porté sur l'étude des mélanges binaires d'alcanes, mais la complexité des carburants a nécessité d'adjoindre à ces mélanges modèles des molécules issues des autres familles chimiques.

Les études présentées pour l'oxydation des mélanges d'hydrocarbures sont résumées dans le tableau II.4.

2.1 Mélanges d'alcanes

Ils représentent sans aucun doute les mélanges les plus étudiés. Parmi ceux-ci se démarquent surtout les mélanges méthane/éthane/propane, représentatifs du gaz naturel, et les mélanges n-heptane/isooctane qui servent de base pour la modélisation et l'étude des propriétés des essences. Les lignes qui suivent présentent un petit résumé des travaux portant sur ce mélange.

Une étude de Dagaut *et al* [76] datée de 1994 et menée en JSR à 10 atm et entre 550 et 1150 K a mis en évidence le fort effet activateur de l'heptane et l'effet inhibiteur de l'isooctane lors de leur combustion en mélange. Ainsi plus la proportion d'isooctane est élevée moins le mélange est réactif. De plus ils n'observent pas l'apparition de nouvelles espèces autres que celles observées lors de l'oxydation de ces deux hydrocarbures isolés, tendant à montrer que les seules interactions entre les mécanismes d'oxydation de ces deux alcanes se font par le réservoir de radicaux communs.

La mise en commun de leurs résultats avec ceux des travaux antérieurs leur a permis de mettre en évidence une évolution monotone des propriétés réactives du mélanges avec l'indice d'octane RON (Research Octane Number, qui correspond à la fraction volumique de l'isoctane dans le mélange) jusqu'à une valeur de RON=70, où apparaît une rupture. Cette cassure est expliquée par l'action de l'isooctane comme puits à radicaux qui empêche, à ces hauts indices, l'heptane d'initier les réactions d'oxydation.

Ces observations sont corroborées ensuite par de nombreux travaux: mesures de délais d'auto-inflammation en machine à compression rapide par Callahan *et al* [77] et Griffiths *et al* [78], en tube à choc par Fieweger *et al* [79], obtention des profils d'espèces en réacteur à écoulement haute pression par Curran *et al* [80] et mesures de vitesses de flamme par Huang *et al* [81].

2.2 Mélanges alcane/alcène

Les alcènes sont, outre des composants des essences, des intermédiaires clés de l'oxydation des alcanes. Pour ces deux raisons ils ont fait l'objet d'études pour déterminer leur impact sur l'oxydation des alcanes.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

La première étude est due à Garner *et al* [82] en 1955 qui ont étudié en réacteur à écoulement deux mélanges isooctène/n-heptane (5/95 et 25/75 en volume). Les profils d'espèces obtenus montrent que l'isooctène agit comme un inhibiteur en augmentant la température d'oxydation de l'heptane, mais qu'il n'intervient pas dans le mécanisme de dégradation de l'alcane. Les auteurs expliquent ces observations par la réaction préférentielle des porteurs de chaîne (H, OH, O) avec l'alcène pour former des radicaux isooctényles stabilisés plutôt qu'avec l'heptane. Ces radicaux isooctényles réagissent ensuite difficilement, n'alimentant pas le pool de radicaux et entraînant par conséquent une baisse de la réactivité de l'heptane. Les mêmes observations et les mêmes conclusions sont obtenues par Bradow et Apelstein [83] en 1967 lors de l'oxydation en moteur CFR d'un mélange isooctane/isooctène.

Une étude plus récente de Brezinsky et Dryer [84] en réacteur à écoulement piston d'un mélange isobutène/n-octane met également en avant l'effet inhibiteur de l'ajout d'isobutène à un alcane. La réactivité du mélange est moindre que celle de l'isooctane seul, ce qui est principalement dû au fait que l'isobutène empêche la dégradation de l'éthylène issu du n-octane en CO puis CO_2, se traduisant en une plus faible augmentation de température. Cet effet inhibiteur est comme précédemment causé par la formation préférentielle de radicaux allyliques stables, mais est ici renforcé par la grande stabilité des produits de dégradation du radical méthylallyle (allène et radical méthyle).

L'étude du mélange isooctane/1-hexène en JSR et tube à choc par Yahyaoui [85] et en MCR par Vanhove [86] a mis en évidence le phénomène opposé, à savoir un effet inhibiteur de l'alcane, même si celui-ci reste faible à haute température. Ceci est expliqué par la réactivité plus élevée de l'alcène par rapport à l'alcane (ce qui n'était pas le cas dans les études précédentes) et une réactivité plus élevée des radicaux isooctyles que des radicaux hexényles (stabilisés par résonance) qui fixent ainsi plus facilement l'oxygène à basse température et réagissent plus rapidement à haute température avec les porteurs de chaîne.

2.3 Mélanges alcane/alcène/aromatique

Les carburants commerciaux contiennent une part importante d'aromatiques. Ces composés, moins réactifs que les alcanes, peuvent avoir un effet non négligeable sur l'oxydation des autres hydrocarbures présents dans le mélange initial.

En 1993, Ciajolo *et al* [87] ont étudié l'oxydation d'un mélange toluène/n-heptane 80/20 (vol/vol) en JSR (7 bar, φ=1, T=590 K). L'étude des profils temporels des espèces montre une

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

combustion en deux étapes: une oxydation lente caractérisée par une forte concentration en benzaldéhyde suivie d'une oxydation de haute température marquée par l'apparition des produits d'oxydation du n-heptane. Ces résultats surprenants compte-tenu de la faible réactivité du toluène par rapport au n-heptane sont expliqués de la manière suivante par les auteurs: à faible température le toluène, qui fournit des radicaux plus stables que le n-heptane (benzyle) est l'hydrocarbure majoritairement oxydé mais à plus haute température la température d'inversion de la réaction d'addition de l'oxygène ($R+O_2 \leftrightarrows RO_2$) est plus rapidement atteinte pour le toluène, dont l'oxydation est alors ralentie, que pour le n-heptane qui devient alors le seul hydrocarbure à pouvoir fixer l'oxygène, laissant ainsi apparaître ses produits d'oxydation.

En 1997 et 1998, Brezinsky *et al* publient deux études en réacteur à écoulement portant sur l'oxydation des mélanges méthylcyclohexane/toluène [31] et butane/toluène [88]. Elles aboutissent toutes deux aux mêmes conclusions, à savoir que le toluène a un effet inhibiteur sur l'oxydation du deuxième hydrocarbure, que la réactivité dépend fortement de la proportion en alcane/cyclane et que les hydrocarbures constitutifs du mélange s'oxydent par des mécanismes indépendants et identiques à ceux des composés purs, les interactions se faisant majoritairement via les petits radicaux.

Ces résultats sont en partie confirmés en 2005 par Yahyaoui [85] qui étudie en JSR et tube à choc l'oxydation des mélanges isooctane/toluène (59/41 mole/mole), toluène/hex-1-ène (70/30 mole/mole) et isooctane/toluène/hex-1-ène (50/35/15 mole/mole/mole). La présence de toluène agit comme un inhibiteur par piégeage des porteurs de chaîne et formation consécutive de radicaux benzyles peu réactifs (d'où diminution de réactivité). Cependant une étude menée en 2004 par Vanhove [86] en MCR sur les mêmes mélanges mais à plus basse température (600-900 K) met en évidence la présence de produits de recombinaisons croisées (éthylbenzène, 3-méthyl-3-buténylbenzène, heptényllbenzène,...). Ces observations vont à contre-sens des travaux précédemment cités mais sont expliqués par l'auteur comme le résultat de la recombinaison de radicaux à longue durée de vie (benzyle, isobutényle, méthyle,...) : les réactions radical-radical entre ces espèces ont par conséquent le temps de se produire. Un autre fait remarquable observé pour le mélange toluène/hex-1-ène est que le toluène est oxydé à basse température donnant lieu à l'apparition de nombreux produits aromatiques qui ne sont pas détectés lors de l'oxydation du toluène pur dans les mêmes conditions. Ce fait illustre parfaitement les interactions entre les deux hydrocarbures via les porteurs de chaîne produits initialement par l'alcène.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

En 2004 Gauthier *et al* [89] ont mesuré en tube à choc haute pression les délais d'auto-inflammation de deux mélanges ternaires isooctane/toluène/n-heptane. Ils ont constaté que ce mélange représentait convenablement une essence commerciale dans leurs conditions opératoires et qu'il présentait une zone de coefficient négatif de température peu marquée. Ils ont également mis en évidence la diminution des délais lors d'une augmentation de la richesse ou de la proportion en gaz brûlés.

La même année Andrae *et al* [90] ont étudié expérimentalement et modélisé l'oxydation de mélanges n-heptane/isooctane et n-heptane/toluène. Leurs expériences sont menées en moteur mono-cylindre et ont permis la mesure des vitesses de dégagement de chaleur. Leurs simulations utilisent des modèles auxquels ont été ajoutées les réactions de co-oxydation entre les 2 hydrocarbures initiaux R_1H et R_2H suivantes: $R_1+R_2H \leftrightarrows R_1H+R_2$, $R_1O_2+R_2H \leftrightarrows R_1O_2H+R_2$ et $R_2O_2+R_1H \leftrightarrows R_2O_2H+R_1$. La comparaison entre modèle et expérience montre l'importance de ces réactions qui permettent une meilleure prédiction des résultats, montrant ainsi que l'interaction n'a pas uniquement lieu via le pool de petits radicaux.

Herzler *et al* [91] ont mesuré en 2007 les délais d'auto-inflammation en tube à choc d'un mélange toluène/heptane 72/28 (mole/mole) entre 620 et 1180 K pour des richesses de 0,3 à 1 et des pressions de 10, 30 et 50 bar. Ils observent une zone de coefficient négatif de température entre 770 et 900 K à la stœchiométrie et et des pressions de 30 et 50 bar, qui est décalée vers les plus basses températures à 10 bar et disparaît complètement en milieu pauvre, le mélange ne s'enflammant plus en deçà d'une température critique dépendante de la pression. La comparaison avec les résultats obtenus pour les 2 hydrocarbures purs montre que la réactivité du mélange est intermédiaire, en étant toutefois plus proche de celle du toluène. La même équipe a récemment publié une étude [92] portant sur l'oxydation des mélanges heptane / isooctane / éthanol et heptane / isooctane / toluène / diisobutylène en tube à choc dans les mêmes conditions de température et pression. Ils observent un comportement identique de ces mélanges par rapport au mélange heptane/toluène, mais ceux-ci sont tout de même plus réactifs.

Dans une récente communication, Natelson *et al* [93] ont présenté des résultats concernant l'oxydation en réacteur à écoulement de deux mélanges décane/butylcyclohexane/butylbenzène. Ces résultats, à savoir l'évolution de la quantité de CO produite à pression et temps de séjour constants en fonction de la température ont été comparés aux mêmes données obtenues à partir d'un carburant diesel et d'un kérosène standard. Cette comparaison montre que les mélanges modèles utilisés se

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

révèlent être dans tous les cas trop réactifs par rapport aux carburants réels, qui ont une masse molaire plus élevée que les modèles.

Enfin, on peut également citer les travaux de Machrafi *et al* [94] qui ont également étudié en moteur CFR des mélanges heptane/isooctane et heptane/toluène à différentes richesses et différents taux de compression. Ils ont ainsi pu déterminer en fonction de ces paramètres les délais d'auto-inflammation, les vitesses de dégagement de chaleur et suivre l'évolution des concentrations d'éthylène, de formaldéhyde, de peroxyde d'hydrogène et du radical OH durant un cycle moteur. Ils constatent qu'à la fois l'isooctane et le toluène inhibent la réactivité de l'heptane, mais par des mécanismes chimiques différents et que l'effet du toluène est plus prononcé.

Mélange	**Conditions expérimentales**			**réacteur**	**résultats**	**référence**
	T (K)	**P (bar)**	**φ**			
n-heptane/ isooctane	550-1150	10	1	auto-agité	profils d'espèces	Dagaut *et al* [76]
n-heptane/ isooctane	500-1250	0,2-20	1	à écoulement	profils d'espèces	Callahan *et al* [77]
	630-910	12-17	1	MCR	délais d'auto-inflammation	
n-heptane/ isooctane	650-950	7,5-9	1	MCR	délais d'auto-inflammation	Griffiths *et al* [78]
n-heptane/ isooctane	700-1200	40	1	tube à choc	délais d'auto-inflammation	Fieweger *et al* [79]
n-heptane/ isooctane	500-850	12,5	1	à écoulement	profils d'espèces	Curran *et al* [80]
n-heptane/ isooctane	298	1	0,7-1,4	brûleur	vitesses de flamme	Huang *et al* [81]
n-heptane/ isooctène	556-838			à écoulement	profils d'espèces	Garner *et al* [82]
n-heptane/ isooctène	1023-1203	10-27	≈1,2	moteur CFR	profils d'espèces	Bradow et Appelstein [83]
isobutène/ n-octane	1080	1	0,97	à écoulement	profils d'espèces	Brezinsky et Dryer [84]
hexène/toluène hexène/ isooctane isooctane/ toluène isooctane/ hexène/toluène	750-1170	10	0,5-1,5	auto-agité	profils d'espèces	Yahyaoui [85]
	1360-1860	2-10	1	tube à choc	délais d'auto-inflammation	
	600-900	10-20	1	MCR	profils d'espèces délais d'auto-inflammation	Vanhove [86]

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Mélange	Conditions expérimentales			réacteur	résultats	référence
	T (K)	P (bar)	φ			
toluène/ n-heptane	590	7	1	parfaitement agité	profils d'espèces	Ciajolo *et al* [65]
méthylcyclo-hexane/toluène	1160	1	1,3	à écoulement	profils d'espèces	Zeppieri *et al* [31]
n-butane/toluène	1169	1	0,76	à écoulement	profils d'espèces	Klotz *et al* [88]
isooctane/ toluène/heptane	850-1280	15-60	0,5-2	tube à choc	délais d'auto-inflammation	Gauthier *et al* [89]
n-heptane/ toluène		taux de compres-sion: 16,7	0,18-0,33	moteur mono-cylindre	profils d'espèces profils de pression	Andrae *et al* [90]
n-heptane/ toluène	620-1180	10-50	0,3-1	tube à choc	délais d'auto-inflammation	Herzler *et al* [91]
n-heptane/iso-octane/éthanol n-heptane/iso-octane/toluène/ diisobutylène	690-1200	10-50	1	tube à choc	délais d'auto-inflammation	Fikri *et al* [92]
décane/butyl-benzène/butyl-cyclohexane	600-800	8	0,3	à écoulement	profil de co	Natelson *et al* [93]
n-heptane/iso-octane heptane/toluène		taux de compres-sion: 6-13,5	0,18-0,53	moteur CFR	délais d'auto-inflammation	Machrafi et Cavadias [94]

Tableau II.4: Résumé (non exhaustif) des travaux disponibles sur l'oxydation des mélanges d'hydrocarbures

3. Modélisation cinétique

La modélisation est aujourd'hui devenu un passage obligé non seulement pour comprendre les mécanismes réactionnels mis en jeu lors des processus de combustion et expliquer les résultats expérimentaux obtenus, mais aussi parce qu'elle permet la prévision du comportement de carburants dans des conditions difficilement réalisables expérimentalement.

Les récents progrès des ordinateurs en terme de puissance de calcul ont permis aux modèles d'être de plus en plus détaillés tout en conservant des temps de calcul raisonnables.

Dans cette partie, nous présenterons les principaux modèles recensés pour l'oxydation du n-décane, du n-propylcyclohexane et des alkylbenzènes.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

3.1 Modélisation de l'oxydation du n-décane

En 1990, Delfau *et al* [20] proposent un mécanisme détaillé pour l'oxydation du décane qui trouve ses bases dans un précédent mécanisme développé par la même équipe et simulant la combustion de l'acétylène. Ce mécanisme de haute température comprenant 43 espèces et 221 réactions ne considère qu'un seul radical décyle (tous les isomères sont rassemblés sous une espèce unique). Il a été validé en simulant les profils de concentration d'une étude de flamme riche de décane. L'accord calculs-expériences est relativement bon excepté pour les butènes et leurs dérivés.

En 1997, la même équipe [95] publie un nouveau mécanisme plus complet et réactualisé en deux versions différentes. La première considère tous les isomères du radical décyle et comporte 78 espèces pour 638 réactions, alors que la seconde ne considère que le radical 3-décyle pour représenter les 5 isomères et par conséquent ne contient que 62 espèces pour 467 réactions. Dans les deux cas, l'accord entre profils d'espèces expérimentaux et calculés pour une flamme prémélangée décane/O_2/Ar est correct, avec néanmoins une mauvaise prédiction des profils des oléfines de masse élevée par le second mécanisme.

Dagaut *et al* [4] modélisent en 1994 leurs résultats obtenus en JSR entre 550 et 1150 K au moyen d'un mécanisme détaillé issu de leurs travaux antérieurs. Ils obtiennent un bon accord pour des températures supérieures à 800 K tandis qu'au-dessous apparaît la nécessité d'inclure la chimie des peroxyalkyles.

En 2000, Lindstedt et Maurice [96] propose à leur tour un mécanisme cinétique d'oxydation du décane. Ce mécanisme détaillé composé de 1085 réactions et 193 espèces est utilisé pour modéliser, et ce de manière correcte, les résultats obtenus par Douté *et al* [21] pour une flamme plate de prémélange décane/O_2/N_2.

En 2000, Zeppieri *et al* [10] élaborent un modèle squelettique pour l'oxydation du décane, basé sur celui du n-heptane provenant du même laboratoire. Ce mécanisme propose une originalité par rapport au précédent: il inclut une chimie détaillée de haute température du décane et des radicaux décyles, mais ces derniers sont supposés en équilibre thermodynamique permanent, permettant ainsi par le calcul de la concentration d'un seul de ces radicaux de connaître celle des quatre autres. Ce mécanisme est validé par simulation de profils d'espèces en réacteur à écoulement, en JSR et délais d'auto-inflammation en tube à choc. Un bon accord est obtenu entre simulation et expérience, surtout à très haute température. Ce modèle est repris en 2005 par Zhao *et al* [18] qui l'actualisent (système H_2/O_2, base C_1-C_3) et le valident pour la simulation de vitesse de flamme.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

En 2001 Bikas et Peters [97] publient également un mécanisme d'oxydation du n-décane. Ce mécanisme semi-détaillé de 67 espèces et environ 600 réactions est validé en tube à choc, réacteur auto-agité et en flamme (vitesse de flamme et structure de flamme). Ce modèle sera repris en 2007 par Zhukov *et al* [14] qui le valideront en simulant des délais d'auto-inflammation obtenus en tube à choc.

En 2007 Kumar et Sung [19] réutilisent les modèles de Zeppieri [10] et Zhao [18], et compare les prévisions de ces modèles aux vitesses de flamme de décane qu'ils ont mesurées. Les deux modèles fournissent une estimation correcte, mais on remarque que le modèle de Zhao fournit de meilleurs résultats en milieu pauvre que celui de Zeppieri, alors que la situation s'inverse en milieu riche.

En 2006, Olchanski et Burcat [13] publient en sus de leurs délais d'auto-inflammation obtenus en tube à choc un mécanisme détaillé du décane validé sur ces données expérimentales. Le mécanisme (433 réactions, 69 espèces) proposé n'envisage la formation que de 3 radicaux décyles (1-décyle, 2-décyle, 3-décyle) et que de deux décènes (1-décène et 2-décène), les autres isomères ayant une importance moindre selon les auteurs.

Outre ces mécanismes écrits manuellement par les différents auteurs, de nombreux laboratoires se concentrent sur la mise au point de logiciels permettant de générer automatiquement des mécanismes de grande taille. Ainsi en 1996, Nehse *et al* [98] proposent un mécanisme d'oxydation du n-décane qui est validé sur les données en tube à choc de Pfahl *et al* [11]. De même en 1998 Glaude *et al* [99] proposent un mécanisme du décane généré par le logiciel EXGAS comprenant 1216 espèces pour 7920 réactions, mécanisme qu'ils valident sur les résultats de Balès-Guéret en réacteur auto-agité. En 2000 Battin-Leclerc [100] génère un nouveau modèle d'oxydation du n-décane au moyen d'Exgas. Ce nouveau modèle est validé sur les résultats de Delfau *et al* [20] pour une flamme plate riche et sur ceux de Dagaut *et al* [5] en réacteur auto-agité et milieu stœchiométrique (550-1150 K). Il sera de nouveau modifié en 2008 par Biet [9] et validé dans les mêmes conditions, avec une meilleure simulation des expériences en réacteur auto-agité. Enfin en 2006, Moréac *et al* [101] génère eux aussi un modèle pour le n-décane grâce au logiciel REACTION. Ce modèle de 485 espèces et 3684 réactions est validé sur les données en tube à choc de Pfahl [11].

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

3.2 Modélisation de l'oxydation des naphtènes

Il existe beaucoup moins de modèles cinétiques pour l'oxydation des cyclanes que pour celle des alcanes. De plus, les mécanismes tenant compte des réactions de basse température sont très récents et ne concernent pratiquement que le cyclohexane.

En 1992, Balès-Guéret *et al* [7] proposent un mécanisme quasi-global pour l'oxydation du n-propylcyclohexane. Il est constitué d'un mécanisme détaillé de l'oxydation des composés de 0 à 4 atomes de carbone, et d'un mécanisme global de dégradation du composé naphténique (21 réactions). Ce mécanisme reproduit de manière satisfaisante leurs résultats en JSR.

En 1998 Voisin [26] propose un mécanisme d'oxydation de haute température du cyclohexane. Ce mécanisme est validé sur des résultats en JSR à 10 atm. Il obtient un bon accord simulations-expériences, mais le modèle se révèle trop peu réactif à haute température (T>900 K). En 2000 El Bakali *et al* [28] réactualisent ce mécanisme et y ajoutent les réactions relatives à la formation du 1-hexène. Ce nouveau mécanisme compte alors 771 réactions pour 107 espèces, et est validé sur les résultats obtenus en JSR à 1 et 10 atm ainsi que sur les vitesses de flamme de Davis *et al* [102].

Ensuite Ristori [32] élabore un mécanisme pour l'oxydation du propylcyclohexane en s'appuyant sur les travaux de Voisin. Le mécanisme présenté contient 1369 réactions et 176 espèces, et ne concerne que la chimie de haute température. Il est utilisé pour la modélisation des expériences d'oxydation du cyclohexane et du propylcyclohexane en JSR à 1 atm entre 950 et 1250 K. En 2005 Mati [34] reprend ce mécanisme dont il modifie quelques données cinétiques et thermodynamiques. L'accord entre les résultats en JSR à 1 et 10 atm est satisfaisant, même si le modèle s'avère trop peu réactif à haute température, tout comme le modèle de El Bakali.

En 2003 Granata *et al* [103] développent un mécanisme semi-détaillé pour la pyrolyse et l'oxydation des naphtènes. Leur mécanisme est validé dans de nombreuses conditions: inflammation en réacteur fermé et en MCR, profils d'espèces en JSR, vitesses de flamme pour le cyclohexane et profils d'espèces en réacteur à écoulement pour le méthylcyclohexane. Les délais calculés sont en bon accord avec ceux mesurés, tout comme les profils d'espèces.

En 2006 Orme *et al* [35] propose un mécanisme cinétique détaillé comprenant 190 espèces et 904 réactions réversibles pour simuler leurs délais d'auto-inflammation du méthylcyclohexane obtenus en tube à choc. L'accord simulation-expérience est satisfaisant même si le modèle se montre trop réactif. Une validation supplémentaire est effectuée pour les travaux de Zeppieri *et al*

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[31] en réacteur à écoulement. L'accord qualitatif et quantitatif pour les profils d'espèces est convenable, excepté pour le méthane dont la concentration est sous-estimée. Une analyse de sensibilité et de voies réactionnelles met en évidence les principales voies de dégradation du méthylcyclohexane ainsi que l'importance que revêt la chimie du système H_2/O_2.

En 2007 Pitz *et al* [36] complètent ce mécanisme en lui ajoutant les réactions relatives à l'oxydation de basse température du méthylcyclohexane. Ce modèle est testé et validé sur des résultats obtenus en machine à compression rapide (φ=1, P=10, 15 et 20 atm). Les auteurs montrent que les estimations des paramètres cinétiques des réactions d'isomérisation utilisées pour les alcanes linéaires ne sont pas applicables au cas des naphtènes, et doivent être corrigées

La même année Silke *et al* [104] et Cavalotti *et al* [105] publient chacun un article présentant un modèle d'oxydation du cyclohexane à basse température, validé sur les délais en MCR de Lemaire [30] et sur les résultats en réacteur auto-agité de El Bakali [28]. Parmi les réactions de basse température, Cavalotti estime au moyen de calculs *ab initio* certaines constantes de vitesse, notamment celles des réactions d'isomérisation des radicaux $cyC_6H_{11}O_2$ et de formation des éthers. Silke *et al* choisissent une autre démarche. A partir des estimations communément utilisées pour les paraffines linéaires, ils proposent une méthode d'ajustement des paramètres cinétiques tenant compte de la présence du cycle à 6 carbone. De plus, ces derniers envisagent pour les espèces $cyC_6H_{10}O_2O_2H$ de nouvelles voies d'isomérisation non conventionnelles facilitées par rapport aux voies traditionnelles qui sont ici défavorisées par la présence du cycle. Ces nouvelles voies d'isomérisation consistent en l'abstraction, lors de l'étape d'isomérisation, d'un atome d'hydrogène autre que celui du carbone portant le groupement hydroperoxy. Le nouveau radical formé $^{\bullet}U'(O_2H)_2$ se décompose ensuite selon les positions relatives du site radicalaire et des groupements $-O_2H$ via différents processus (rupture C−C, perte de HO_2 pour former un alcène,...) pour aboutir après plusieurs étapes à l'ouverture du cycle. Un exemple de ces réactions est visible sur la figure II.1.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

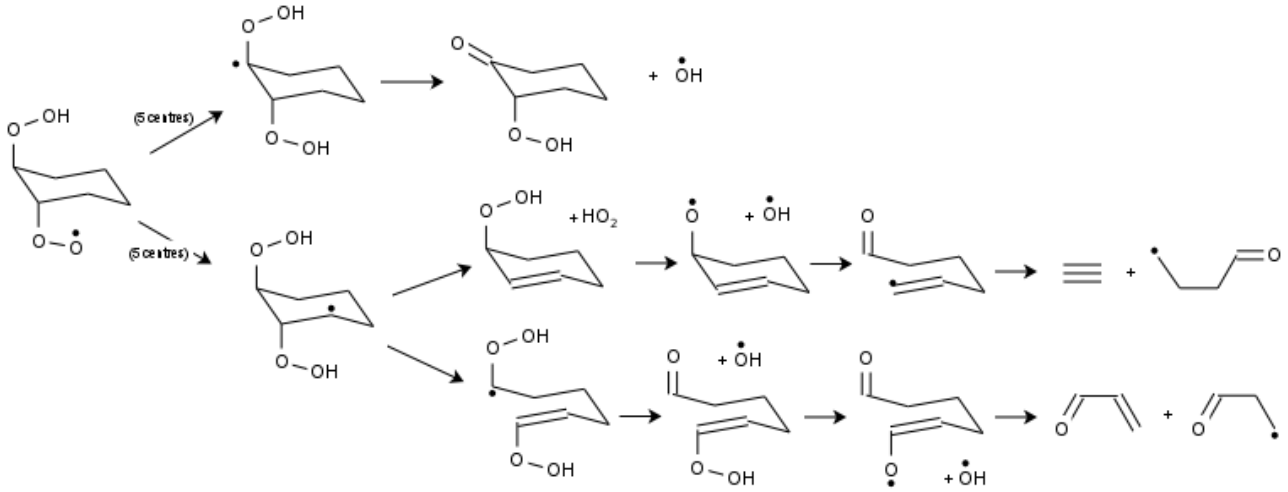


Figure II.8: Exemples de réactions d'isomérisation conventionnelles et non conventionnelles des radicaux $cyC_6H_{10}O_2O_2H$ proposées par Silke *et al* [104]

3.3 Modélisation de l'oxydation des hydrocarbures aromatiques

La dichotomie rencontrée lors des études expérimentales entre benzène-toluène et alkylbenzène se retrouve également lors des travaux de modélisation, benzène et toluène ayant focalisés la majeure partie de ces travaux.

En 1992 Emdee *et al* [106] développent un mécanisme d'oxydation du benzène et du toluène, référencé dans de nombreuses publications sous le nom de mécanisme EBG. Ce modèle d'une centaine de réactions a été validé sur des profils d'espèces obtenus en réacteur à écoulement aux alentours de 1000 K. Le modèle reproduit convenablement les résultats expérimentaux, mais échouent quant à la modélisation d'autres systèmes d'oxydation (flammes par exemple). En 1995, Zhang et Mc Kinnon [107] modifient ce mécanisme EMD et modélisent avec succès les résultats de Bittner (flamme riche de benzène). Un an plus tard Davis *et al* [52] reprennent à leur tour ce mécanisme: ils y modifient certaines constantes de vitesses et prennent en compte les effets de pression. Ils obtiennent alors un bon accord modèle-expérience pour les données en réacteur piston et les vitesses de flamme uniquement en milieu stœchiométrique et riche. En 2000 Alzueta *et al* [108] proposent également un mécanisme d'oxydation du benzène qu'ils valident en simulant des résultats obtenus précédemment en réacteur à écoulement et en réacteur auto-agité.

En 2003, Da Costa *et al* [109] proposent un mécanisme détaillé d'oxydation du benzène. Ce modèle est validé sur leurs résultats obtenus en réacteur auto-agité et tube à choc. En 2005, ce mécanisme est complété par Bounaceur *et al* [110] afin de pouvoir simuler l'oxydation du toluène.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Ce nouveau mécanisme est également validé sur leurs expériences menées en réacteur auto-agité et tube à choc.

Au LCSR Voisin [26] puis Ristori [32, 46] ont proposé un mécanisme d'oxydation du benzène qui au final comporte 921 réactions pour 120 espèces. Ce mécanisme est validé dans de nombreuses conditions (JSR à 1 et 10 atm, vitesses de flamme, délais d'auto-inflammation) et fournit, dans l'ensemble, des résultats en bon accord avec l'expérience. Par la suite, Pengloan [47] et Ristori [32] vont fournir des modèles d'oxydation du toluène, de l'éthylbenzène, du styrène et du propylbenzène qu'ils valident par comparaison avec leurs résultats en JSR (1 et 10 atm) et des vitesses de flamme pour le toluène. En 2005, Mati [34] reprend le mécanisme d'oxydation du propylbenzène qu'il adapte pour simuler les données à haute pression. Ce modèle est alors validé sur toutes les données disponibles en JSR pour les aromatiques (du benzène au propylbenzène): l'accord calculs-expériences est bon mais le modèle se montre trop peu réactif à haute température et haute pression.

En 2004 Sivaramakrishnan *et al* [60] reprennent le modèle EBG qu'ils modifient en y ajoutant la dépendance en pression des constantes de vitesse pour modéliser leurs résultats obtenus en tube à choc à très haute pression. Ils obtiennent un bon accord de ces simulations avec l'expérience à basse température (1200-1300 K) mais pas à plus haute température (T>1350 K) où le modèle n'est pas assez réactif.

Concernant le butylbenzène qui est une des molécules que nous avons étudiée, Freund et Olmstead [111] ont proposé en 1989 un mécanisme de pyrolyse comportant 29 espèces et 60 réactions. Les résultats simulés sont comparés aux vitesses de réaction et de sélectivité des produits obtenus par Rebick [112] entre 778 et 868 K. Les résultats simulés s'accordent bien avec ceux expérimentaux excepté pour les espèces méthane et 3-phénylpropène. En 2000 Ribaucour *et al* [74] proposent un mécanisme d'oxydation de basse température du butylbenzène. Il est basé sur le sous-mécanisme du butane des travaux de Curran *et al* [113], modifié par la ré-évaluation des constantes de vitesses des cétohydroperoxydes et la prise en compte de la substitution par un groupement phényl et de nouveaux paramètres cinétiques. Le mécanisme obtenu comporte 1149 réactions pour 197 espèces (dont 105 aromatiques), et ne comprend aucune réaction d'oxydation du cycle. Il a été validé sur les délais d'auto-inflammation obtenus en machine à compression rapide.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

© 2009 Tous droits réservés.

http://doc.univ-lille1.fr

CONCLUSION

Les travaux relatifs à l'oxydation des hydrocarbures sont nombreux et ont permis de se forger aujourd'hui une idée précise des mécanismes mis en jeu lors ce de processus. Cependant il existe une grande disparité sur la répartition des études: une immense majorité concerne en effet l'oxydation des alcanes, essentiellement ceux comprenant de 1 à 8 atomes de carbone. Les travaux disponibles pour le n-décane, un des hydrocarbures concerné par la présente étude, sont assez nombreux et couvrent un large domaine de pression et de température, même si le domaine des hautes températures accapare la quasi-totalité des travaux [6-8, 10, 12-14, 16-21]. Il en est de même pour les modèles recensés dans la littérature. Ces modèles se révèlent aptes à simuler l'oxydation de haute température du décane [18,97], mais les rares modèles tenant compte de la chimie de basse température [98-101] éprouvent encore des difficultés à représenter correctement l'oxydation de cet hydrocarbure aux plus faibles températures, même s'ils sont de plus en plus fiables [9].

La cinétique d'oxydation des naphtènes est quant à elle bien moins connue. Les rares travaux de la littérature concernent essentiellement le cyclohexane, les alkylcyclohexanes ne représentant qu'une faible proportion des études. Cependant les mécanismes d'oxydation ne sont pas très différents de ceux des alcanes, même si la présence du cycle induit quelques particularités. En modélisation la tendance est identique, et la plupart des modèles ne prennent en compte que la chimie de haute température des naphtènes [31-35, 103], même si depuis quelques années apparaissent des modèles applicables à l'oxydation de basse température du cyclohexane [104, 105] et du méthylcyclohexane [36].

L'étude de l'oxydation des aromatiques a débuté durant la première moitié du 20ème siècle avec les travaux de Burgoyne [38, 39] mais ce n'est que suite aux publications de l'équipe de Brezinsky [42, 43, 57, 66-69] que les mécanismes de dégradation du noyau aromatique ont été décrits. La majorité de ces études ne s'est intéressée qu'au benzène et au toluène, délaissant les alkylaromatiques de taille supérieure, dont les voies de dégradation s'apparente à celle des alcanes. Les différents modèles développés s'appuient pour la plupart sur le modèle initialement développé par Emdee *et al* [106], validé à haute température. Le butylbenzène, hydrocarbure considéré dans cette étude, a été l'objet de quelques études expérimentales [41, 69] et un modèle de basse température a été validé en machine à compression rapide [74].

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

L'étude de la cinétique d'oxydation des mélanges a débuté par celle du mélange heptane/isooctane [76-83], représentatif de la fraction paraffinique des essences. Les résultats ont montré un effet inhibiteur de l'alcane ramifié qui appauvrit le « pool » des porteurs de chaîne. Mais les paraffines ne peuvent représenter de manière correcte l'oxydation des carburants réels et l'ajout d'hydrocarbures aromatiques, naphténiques et/ou oxygénés s'est avéré nécessaire. Cependant ces mélanges modèles, s'ils sont alors plus ou moins représentatifs de la composition et des caractéristiques des carburants commerciaux, se révèlent être plus réactifs que ces carburants réels [93].

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

RÉFÉRENCES

[1] J. M. Simmie

Detailed chemical kinetic models for the combustion of hydrocarbon fuels, Progress in Energy and Combustion Sciences, 2003, vol. 29, pp. 599-634

[2] E. Ranzi, P. Gaffuri, . Faravelli and P. Dagaut

A wide-range modelling study of n-heptane oxidation, Combustion and Flame, 1995, vol. 103, pp.91-106

[3] F. Battin-Leclerc

Detailed chemical kinetics models for the low-temperature combustion of hydrocarbons with application to gasoline and diesel fuel surrogates, Progress in Energy and Combustion Science, 2008, vol. 34, pp. 440-498

[4] P. Dagaut, M. Reuillon and M. Cathonnet

High pressure oxidation of liquid fuels from low to high temperature. 3.n-decane, Combustion Science and Technology, 1994, vol. 103, pp.349-359

[5] P. Dagaut, M. Reuillon, M. Cathonnet and D. Voisin

High pressure oxidation of normal decane and kerosene in dilute conditions from low to high temperature, Journal de Chimie Physique et Physico-Chimie Biologique, 1995, vol. 92, pp.47-76

[6] P. Dagaut

On the kinetics of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel, Physical Chemistry and Chemical Physics, 2002, vol. 4, pp.2079-2094

[7] C. Balès-Guéret, M. Cathonnet, J.-C. Boettner and F. Gaillard

Experimental study and kinetic modeling of higher hydrocarbons oxidation in a jet-stirred flow reactor, Energy&Fuels, 1992, vol. 6, pp. 189-194

[8] P. Dagaut, A. El-Bakali and A. Ristori

The combustion of kerosene: Experimental results and kinetic modelling using 1- to 3-component surrogate model fuels, Fuel, 2006, vol. 85, pp. 944-956

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

[9] J. Biet, M. H. Hakka, V. Warth, P.-A. Glaude and F. Battin-Leclerc

Experimental and modeling study of the low-temperature oxidation of large alkanes, Energy&Fuels, 2008, vol. 22 (4), pp. 2258-2269

[10] S. P. Zeppieri, S. D. Klotz and F. L. Dryer

Modelling concepts for larger carbon number alkanes: a partially reduced skeletal mechanism for n-decane oxidation and pyrolysis, Proceedings of the Combustion Institute, 2000, vol. 28, pp.781-789

[11] U. Pfahl, K. Fieweger and G; Adomeit

Self-ignition of diesel relevant hydrocarbon-air mixtures under engine conditions, Proceedings of the Combustion Institute, 1996, vol. 26, pp.781-789

[12] D. C. Horning, D. F. Davidson and R. K. Hanson

Study of the high-temperature auto-ignition of n-alkane/O_2/Ar mixtures, Journal of Propulsion and Power, 2002, vol. 18, pp. 363-371

[13] E. Olchanski and A. Burcat

Decane oxidation in a shock tube, International Journal of Chemical Kinetics, 2006, vol. 38, pp.703-713

[14] V. P. Zhukov, V. A. Sechenov and A. Y. Starikovskii

Autoignition of n-decane at high pressure, Combustion and Flame, 2008, vol. 153, pp. 130-136

[15] D. F. Davidson, J. T. Herbon, D. C. Horning and R. K. Hanson

OH concentration time histories in n-alkane oxidation, International Journal of Chemical Kinetics, 2001, vol. 33, pp.775-783

[16] P. Wagner and G. L. Dugger

Flame propagation V. Structural influences on burning velocity-Comparison of measured and calculated burning velocities, Journal of the American Chemical Society, 1955, vol. 77, pp.227-231

[17] M; S. Skjoth-Rasmussen, M. Braun-Unkhoff, C. Naumann and P. Frank

Experimental and numerical study of n-decane chemistry, Proceedings of the European Combustion Meeting, 2003

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[18] Z. Zhao, J. LI, A. Kazakov, F. L. Dryer and S. P. Zeppiery

Burning velocities and a high temperature skeletal kinetic model for n-decane, Combustion Science and Technology, 2005, vol. 177, pp. 89-106

[19] K. Kumar and C.-J. Sung

Laminar flame speeds and extinction limits of preheated n-decane/O_2/N_2 and n-dodecane/ O_2/N_2 mixtures, Combustion and Flame, 2007, vol. 151, pp. 209-224

[20] J.-L. Delfau, M. Bouhria, M. Reuillon, O. Sanogo, R. Akrisch and C. Vovelle

Experimental and computational investigations of the structure of a sooting decane-O_2-Ar flame, Proceedings of the Combustion Institute, 1990, vol. 23, pp.1567-1572

[21] C. Douté, J.-L. Delfau, R. Akrisch and C. Vovelle

Chemical structure of atmospheric pressure premixed n-decane and kerosene flames, Combustion Science and Technology, 1995, vol. 106, pp. 327-344

[22] A. P. Zeelenberg and H. W. De Bruijn

Kinetics, mechanism and products of the gaseous oxidation of cyclohexane, Combustion and Flame, 1965, vol. 9, pp. 281-295

[23] B. H. Bonner and C. F. H. Tipper

The cool flame combustion of hydrocarbons. 1-Cyclohexane, Combustion and Flame, 1965, vol. 9, pp.317-327

[24] P. J. Bennett, D. Gregory and R. A. Jackson

Mechanistic studies on the combustion of isotopically labelled cyclohexane within a single cylinder internal combustion engine, Combustion Science and Technology, 1996, vol. 115, pp.83-103

[25] A. Marchal

Étude de la contribution des familles chimiques constitutives des gazoles à la formation de polluants non réglementés, Thèse, Universite d'Orléans, 1997

[26] D. Voisin, A. Marchal, M. Reuillon, J.-C. Boettner and M. Cathonnet

Experimental and kinetic modelling study of cyclohexane oxidation in a JSR at high pressure, Combustion Science and Technology, 1998, vol. 138, pp. 137-158

[27] D. Voisin

Cinétique chimique d'oxydation d'hydrocarbures et obtention d'un modèle pour la combustion du kérosène, Thèse, Université d'Orléans

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[28] A. El Bakali, M. Braun-Unkhoff, P. Dagaut, P. Frank and M. Cathonnet

Detailed kinetic reaction mechanism for cyclohexane oxidation at pressure up to ten atmospheres, Proceedings of the Combustion Institute, 2000, vol. 28, pp. 1631-1638

[29] C. S. McEnally and L. D. Pfefferle

Experimental study of fuel decomposition and hydrocarbon growth processes for cyclohexane and related compounds in non premixed flames, Combustion and Flame, 2004, vol. 136, pp. 155-167

[30] O. Lemaire, M. Ribaucour, M. Carlier and R. Minetti

The production of benzene in the low-temperature oxidation of cyclohexane, cyclohexene and cyclohexa-1,3-diene, Combustion and Flame, 2001, vol. 127, pp. 1971-1980

[31] S. P. Zeppieri, K. Brezinsky and I. Glassmann

Pyrolysis studies of methylcyclohexane and oxidation studies of methylcyclohexane and methylcyclohexane/toluene blends, Combustion and Flame, 1997, vol. 108, pp. 266-286

[32] A. Ristori

Modélisation de la combustion du gazole. Étude des aspects chimiques., Thèse, Université d'Orléans, 2000

[33] A. Ristori, P. Dagaut, A. El Bakali and M. Cathonnet

The oxidation of n-propylcyclohexane: experimental results and kinetic modelling, Combustion Science and Technology, 2001, vol. 165, pp. 197-228

[34] K. Mati

Cinétique de combustion du gazole. Étude des aspects chimiques, Thèse, Université d'Orléans, 2005

[35] J. P. Orme, H. J. Curran and J. M. Simmie

An experimental and modelling study of methyl cyclohexane pyrolysis and oxidation, Journal of Physical Chemistry A, 2006, vol. 110, pp. 114-131

[36] W. J. Pitz, C. V. Naik, T. Nì Mhaoldúin, C. K. Westbrook, H. J. Curran, J. P. Orme and J. M. Simmie

Modeling and experimental investigation of methylcyclohexane ignition in a rapid compression machine, Proceedings of the Combustion Institute, 2007, vol. 31, pp. 267-275

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

[37] C. S. McEnally and L. D. Pfefferle

Fuel decomposition and hydrocarbon growth processes for substituted cyclohexanes and for alkenes in non premixed flames, Proceedings of the Combustion Institute, 2005, vol. 30, pp. 1425-1432

[38] J. H. Burgoyne

The combustion of aromatics and alicyclic hydrocarbons, I- The slow combustion of benzene, toluene, ethylbenzene, n-propylbenzene, o-xylene, m-xylene, p-xylene and mesitylene, Proceedings of the Royal Society A, 1937, vol. 161, pp.48-

[39] J. H. Burgoyne, T. L. Tang and D. M. Newitt

The combustion of aromatic and alicyclic hydrocarbons, III- Ignition and cool flamme characteristics, Proceedings of the Royal Society A, 1939, vol. 174, pp.379-

[40] K. C. Salooja

Studies of combustion processes leading to ignition of aromatics hydrocarbons, Combustion and Flame, 1965, vol. 9, pp. 121-129

[41] A. Roubaud, R. Minetti and L. R. Sochet

Oxidation and combustion of lox alkylbenzenes at high pressure: comparative reactivity and auto-ignition, Combustion and Flame, 2000, vol. 121, pp. 535-541

[42] C. Venkat, K. Brezinsky and I. Glassman

High temperature oxidation of aromatic hydrocarbons, Proceedings of the Combustion Institute, 1982, vol. 19, pp. 143-152

[43] K. Brezinsky

The high-temperature oxidation of aromatic hydrocarbons, Progress in Energy and Combustion Sciences, 1986, vol. 12, pp. 1-24

[44] G. Bermudez and L. D. Pfefferle

Laser ionization time-of-flight mass spectrometry combined with residual gas analysis for the investigation of moderate temperature benzene oxidation, Combustion and Flame, 1995, vol. 100, pp. 41-51

[45] Y. Chai and L. D. Pfefferle

An experimental study of benzene oxidation at fuel-lean and stoichiometric equivalence ratio conditions, Fuel, 1998, vol. 77, pp. 313-320

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[46] A. Ristori, P. Dagaut, A. El Bakali, G. Pengloan and M. Cathonnet

Benzene oxidation: experimental results in a JSR and comprehensive kinetic modelling in JSR, shock-tube and flame, Combustion Science and Technology, 2001, vol. 167, pp. 223-256

[47] G. Pengloan

Étude cinétique de l'oxydation de composés aromatiques: application à la formation de polluants dans les moteurs automobiles, Thèse, Université d'Orléans, 2001

[48] I. Da Costa

Étude cinétique de réactions de composés monoaromatiques en tube à choc et réacteur parfaitement agité, Thèse, Institut Polytechnique National de Lorraine, Nancy, 2001

[49] K. Fieweger, R. Blumenthal and G. Adomeit

Shock-tube investigations on the self-ignition of hydrocarbon-air mixtures at high pressures, Proceedings of the Combustion Institute, 1994, vol. 25, pp. 1579-1585

[50] G. Mittal and C.-J. Sung

Autoignition of toluene and benzene at elevated pressures in a rapid compression machine, Combustion and Flame, 2007, vol. 150, pp. 355-368

[51] J. D. Bittner and J. B. Howard

Composition profiles and reaction mechanism in a near sooting premixed benzene/oxygen/ argon flame, Proceedings of the Combustion Institute, 1981, vol. 18, pp. 1105-1116

[52] S. G. Davis, H. Wang, K. Brezinsky and C. K. Law

Laminar flame speeds and oxidation kinetics of benzene-air and toluene-air flames, Proceedings of the Combustion Institute, 1996, vol. 26, pp. 1025-1033

[53] L. Dupont, A. El Bakali, J.-F. Pauwels, I. Da Costa, P. Meunier and H. Richter

Investigation of stoichiometric methane/air/benzene (1.5%) and methane/air low pressure flames, Combustion and Flame, 2003, vol. 135, pp. 171-183

[54] A. Schöbel-Ostertag, M. Braun-Unkhoff, C. Wahl and L. Krebs

The oxidation of benzene under conditions encountered in waste incinerators, Combustion and Flame, 2005, vol. 140, pp. 359-370

[55] J. A. Barnard and V. J. Ibberson

The gaseous oxidation of toluene. I- The general features of the reactions, Combustion and Flame, 1965, vol. 9, pp. 81-87

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[56] J. A. Barnard and V. J. Ibberson

The gaseous oxidation of toluene. II- The analytical results, Combustion and Flame, 1965, vol. 9, pp. 149-157

[57] K. Brezinsky, T. A. Litzinger and I. Glassman

The high temperature oxidation of the methyl side chain of toluene, International Journal of Chemical Kinetics, 1984, vol. 16, pp. 1053-1074

[58] P. Dagaut, G. Pengloan and A. Ristori

Oxidation, ignition and combustion of toluene: experimental and detailed chemical kinetic modeling, Physical Chemistry and Chemical Physics, 2002, vol. 4, pp. 1846-1854

[59] A. Burcat, R. C. Farmer, R. L. Espinoza and R. A. Matula

Comparative ignition delay times for selected ring-structured hydrocarbons, Combustion and Flame, 1979, vol. 36, pp. 313-316

[60] R. Sivaramakrishnan, R.S. Tranter, K. Brezinsky

High-pressure, high-temperature oxidation of toluene, Combustion and Flame, 2004, vol. 139, pp. 340-350

[61] V. Vasudevan, D. F. Davidson and R. K. Hanson

Shock tube experiments of toluene ignition times and OH concentration time histories, Proceedings of the Combustion Institute, 2005, vol. 30, pp. 1155-1163

[62] D. F. Davidson, B. M. Gauthier and R. K. Hanson

Shock tube ignition measurements of iso-octane/air and toluene/air at high pressures, Proceedings of the Combustion Institute, 2005, vol. 30, pp. 1175-1182

[63] J. F. Griffiths, P. A. Halford-Maw and D. J. Rose

Fundamental features of hydrocarbon autoignition in a rapid compression machine, Combustion and Flame, 1993, vol. 95, pp. 291-306

[64] A. Hamins and K. Seshadri

The structure of diffusion flames burning pure, binary, and ternary solutions of methanol, heptane, and toluene, Combustion and Flame, 1987, vol. 68, pp. 295-307

[65] T. Hirasawa, C. J. Sung, A. Joshi, Z. Yang, H. Wang and C. K. Law

Determination of laminar flame speeds using digital particle image velocimetry: binary fuel blends of ethylene, n-butane, and toluene, Proceedings of the Combustion Institute, 2002, vol. 20, pp. 1427-1434

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[66] T. A. Litzinger, K. Brezinsky and I. Glassman

The oxidation of ethylbenzene near 1060 K, Combustion and Flame, 1986, vol. 63, pp. 251-267

[67] T. A. Litzinger, K. Brezinsky and I. Glassman

Reactions of n-propylbenzene during gas phase oxidation, Combustion Science and Technology, 1986, vol. 50, pp. 117-133

[68] T. A. Litzinger, K. Brezinsky and I. Glassman

Gas-phase oxidation of isopropylbenzene at high temperature, Journal of Physical Chemistry, 1986, vol. 90, pp. 508-513

[69] K. Brezinsky, G. T. Linteris, T. A. Litzinger and I. Glassman

High temperature oxidation of n-alkyl benzenes, Proceedings of the Combustion Institute, 1986, vol. 21, pp. 833-840

[70] P. Dagaut, A. Ristori, A. El Bakali and M. Cathonnet

Experimental and kinetic modeling study of the oxidation of n-propylbenzene, Fuel, 2002, vol. 81, pp. 173-184

[71] M. Scott and R. W. Walker

Addition of toluene and ethylbenzene to mixtures of H_2 and O_2 at773 K: Part I: Kinetic measurements for H and HO_2 reactions with the additives and a data base for H abstraction by HO_2 from alkanes, aromatics and related compounds, Combustion and Flame, 2002, vol. 129, pp. 365-377

[72] C. Ellis, M.S. Scott and R. W. Walker

Addition of toluene and ethylbenzene to mixtures of H_2 and O_2 at773 K: Part 2: Formation of products and determination of kinetic data for H+additive and for other elementary reactions involved, Combustion and Flame, 2003, vol. 132, pp. 291-304

[73] A. Roubaud, O. Lemaire, R. Minetti and L. R. Sochet

High pressure auto-ignition and oxidation mechanisms of o-xylene, o-ethyltoluene, and n-butylbenzene between 600 and 900 K, Combustion and Flame, 2000, vol. 123, pp. 561-571

[74] M. Ribaucour, A. Roubaud, R. Minetti and L. R. Sochet

The low-temperature autoignition of alkylaromatics: experimental study and modeling of the oxidation of n-butylbenzene, Proceedings of the Combustion Institute, 2000, vol. 28, pp. 1701-1707

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[75] A. Ergut, S. Granata, J. Jordan, J. Carlson, J. B. Howard, H. Richter and Y. Levendis

PAH formation in one-dimensional premixed fuel-rich atmospheric pressure ethylbenzene and ethyl alcohol flames, Combustion and Flame, 2006, vol. 144, pp. 757-772

[76] P. Dagaut, M. Reuillon and M. Cathonnet

High pressure oxidation of liquid fuels from low to high temperature. 2. Mixtures of n-heptane and isooctane, Combustion Science and Technology, 1994, vol. 103, pp. 315-336

[77] C. V. Callahan, T.J. Held, F. L. Dryer, R. Minetti, M. Ribaucour, L. R. Sochet, T. Faravelli, P. Gaffuri, E. Ranzi

Experimental data and kinetic modeling of primary reference fuel mixtures, Proceedings of the Combustion Institute, 1996, vol. 26, pp. 739-746

[78] J. F. Griffiths, P. A. Halford-Maw and C. Mohamed

Spontaneous ignition delays as a diagnostic of the propensity of alkanes to cause engine knock, Combustion and Flame, 1997, vol. 111, pp. 327-337

[79] K. Fieweger, R. Blumenthal and G. Adomeit

Self-ignition of S.I. engine model fuels: a shock tube investigation at high pressure, Combustion and Flame, 1997, vol. 109, pp. 599-619

[80] H. J. Curran, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, C. V. Callahan and F. L. Dryer

Oxidation of automotive primary reference fuels at elevated temperatures, Proceedings of the Combustion Institute, 1998, vol. 27, pp. 379-387

[81] Y. Huang, C. J. Sung and J. A. Eng

Laminar flame speeds of primary reference fuels and reformer gas mixtures, Combustion and Flame, 2004, vol. 139, pp. 239-251

[82] F. H. Garner, R. Long and G. A. Webster

The vapor phase oxidation of 2,4,4-trimethylpentene-1 (α-di-isobutylene) and mixtures of this with n-heptane, Proceedings of the Combustion Institute, 1955, vol. 5, pp. 541-545

[83] R. L. Bradow and M. Alperstein

Analytical investigations of isooctane and diisobuylene slow combustion in an Otto-cycle engine, Combustion and Flame, 1967, vol. 11, pp. 26-34

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[84] K. Brezinsky and F. L. Dryer

A flow-reactor study of the oxidation of iso-butylene and an iso-butylene/n-octane mixture, Combustion Science and Technology, 1986, vol. 45, pp. 225-232

[85] M. Yahyaoui

Étude cinétique de la formation de polluants à partir de mélanges représentatifs des essences, Thèse, Université d'Orléans, 2005

[86] G. Vanhove

Oxydation, co-oxydation et auto-inflammation à basses températures d'alcènes et aromatiques types. Étude expérimentales des interactions au sein d'un carburant modèle, Thèse, Université des Sciences et Technologies de Lille, 2004

[87] A. Ciajolo, A. D'Anna and R. Mercogliano

Slow-combustion of n-heptane, iso-octane and a toluene/n-heptane mixture, Combustion Science and Technology, 1993, vol. 90, pp. 357-371

[88] S. D. Klotz, K. Brezinsky and I. Glassman

Modeling the combustion of toluene-butane blends, Proceedings of the Combustion Institute, 1998, vol. 27, pp. 337-344

[89] B. M. Gauthier, D. F. Davidson and R. K. Hanson

Shock tube determination of ignition delay times in full-blend and surrogate fuel mixtures, Combustion and Flame, 2004, vol. 139, pp. 300-311

[90] J. Andrae, D. Johansson, P. Björnbom, P. Risberg and G. Kalghatgi

Co-oxidation in the auto-ignition of primary reference fuels and n-heptane/toluene blends, Combustion and Flame, 2005, vol. 140, pp. 267-286

[91] J. Herzler, M. Fikri, K. Hitzbleck, R. Starke, C. Schulz, P. Roth and G. T. Kalghatgi

Shock-tube study of the autoignition of n-heptane/toluene/air mixtures at intermediate temperatures and high pressures, Combustion and Flame, 2007, vol. 149, pp. 25-31

[92] M. Fikri, J. Herzler, R. Starke, C. Schulz, P. Roth and G. T. Kalghatgi

Autoignition of gasoline surrogates mixtures at intermediate temperatures and high pressure, Combustion and Flame, 2008, vol. 152, pp. 276-281

[93] R. H. Natelson, M. S. Kurman, N. P. Cernansky and D. L. Miller

Experimental investigation of surrogates for jet and diesel fuels, Fuel, 2007, vol. 87, pp. 2339-2342

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[94] H. Machrafi, S. Cavadias and P. Glibert

An experimental and numerical analysis of the HCCI auto-ignition process of primary reference fuels, toluene reference fuels and diesel fuel in an engine, varying the engine parameters, Fuel Processing Technology, 2008, vol. 89 (11), pp. 1007-1016

[95] C. Douté, J.-L. Delfau and C. Vovelle

Modelling of the structure of a premixed n-decane flame, Combustion Science and Technology, 1997, vol. 130, pp. 269-313

[96] R. P. Lindstedt and L. Q. Maurice

Detailed chemical-kinetic model for aviation fuels, Journal of Propulsion and Power, 2000, vol. 16, pp. 187-195

[97] G. Bikas and N. Peters

Kinetic modeling of n-decane combustion and autoignition, Combustion and Flame, 2001, vol. 126, pp. 1456-1475

[98] M. Nehse, J. Warnatz and C. Chevalier

Kinetic modeling of the oxidation of large aliphatic hydrocarbons, Proceedings of the Combustion Institute, 1996, vol. 26, pp. 773-780

[99] P. A. Glaude, V. Warth, R. Fournet, F. Battin-Leclerc, G. Scacchi and G. M. Côme

Modeling of the oxidation of n-octane and n-decane using an automatic generation of mechanisms, International Journal of Chemical Kinetics, 1998, vol. 30, pp. 949-959

[100] F. Battin-Leclerc, R. Fournet, P. A. Glaude, B. Judenherc, V. Warth, G. M. Côme and G. Scacchi

Modeling of the gas-phase oxidation of n-decane from 550 to 1600 K, Proceedings of the Combustion Institute, 2000, vol. 28, pp. 1597-1605

[101] G. Moréac, E. S. Blurock and F. Mauss

Automatic generation of a detailed mechanism for the oxidation of n-decane, Combustion Science and Technology, 2006, vol. 178, pp. 2025-2038

[102] S. G. Davis and C. K. Law

Determination of and fuel structure effects on laminar flame speeds of C_1 to C_8 hydrocarbons, Combustion Science and Technology, 1998, vol. 140, pp. 427-449

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

[103] S. Granata, T. Faravelli and E. Ranzi

A wide range kinetic modeling study of the pyrolysis and combustion of naphtenes, Combustion and Flame, 2003, vol. 132, pp. 533-544

[104] E. J. Silke, W. J. Pitz, C. K. Westbrook and M. Ribaucour

Detailed chemical kinetic modeling of cyclohexane oxidation, Journal of Physical Chemistry A, 2007, vol. 111, pp. 3761-3775

[105] C. Cavalotti, R. Rota, T. Faravelli and E. Ranzi

An initio evaluation of primary cyclo-hexane oxidation reaction rates, Proceedings of the Combustion Institute, 2007, vol. 31, pp. 201-209

[106] J. L. Emdee, K. Brezinsky and I. Glassman

A kinetic model foe the oxidation of toluene near 1200 K, Journal of Physical Chemistry, 1992, vol. 96, pp. 2151-2161

[107] H.-Y. Zhang and J. T. McKinnon

Elementary reaction modeling of high-temperature benzene combustion, Combustion Science and Technology, 1995, vol. 107, pp. 261-300

[108] M. U. Alzueta, P. Glarborg and K. Dam-Johansen

Experimental and kinetic modeling study of the oxidation of benzene, International Journal of Chemical Kinetics, 2000, vol. 32, pp. 498-522

[109] I. Da Costa, R. Fournet, F. Billaud and F. Battin-Leclerc

Experimental and modeling study of the oxidation of benzene, International Journal of Chemical Kinetics, 2003, vol. 35, pp. 503-524

[110] R. Bounaceur, I. Da Costa, R. Fournet, F. Billaud and F. Battin-Leclerc

Experimental and modeling study of the oxidation of toluene, International Journal of Chemical Kinetics, 2005, vol. 37, pp. 25-49

[111] H. Freund and W. N. Olmstead

Detailed chemical kinetic modeling of butylbenzene pyrolysis, International Journal of Chemical Kinetics, 1989, vol. 21, pp. 561-574

[112] C. Rebick

Frontiers of free radical chemistry, *W. A. Pryor, Ed., Acadmic Press, New-York*, 1980, pp. 117-137

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[113] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz and C. K. Westbrook

A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation, Combustion and Flame, 1998, vol. 114, pp. 149-177

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

© 2009 Tous droits réservés.

http://doc.univ-lille1.fr

CHAPITRE III : DISPOSITIF EXPÉRIMENTAL

Introduction 101

1. Le réacteur auto-agité par jets gazeux 103

1.1 Principe des réacteurs parfaitement agités 103

1.2 Description du réacteur auto-agité 103

a) le réacteur 104

b) introduction des réactifs 105

c) prélèvement et échantillonnage 106

2. Calcul des débits 106

3. Analyse des gaz 107

3.1 Analyse des composés hydrocarbonés 108

3.2 Analyse de l'hydrogène 108

3.3 Analyse des espèces O_2, CO, CO_2, CH_2O 108

3.4 Analyse des produits lourds 110

3.5 Analyse qualitative: spectrométrie de masse 110

4. Incertitudes 111

Conclusion 113

Références bibliographiques 115

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

© 2009 Tous droits réservés.

http://doc.univ-lille1.fr

INTRODUCTION

Les dispositifs expérimentaux utilisés pour les études en combustion sont nombreux et variés. On peut ainsi distinguer les brûleurs (à flamme plate, à contre-courant), les tubes à choc, les machines à compression rapide, les réacteurs fermés, à écoulement ou parfaitement agité. Chacun de ces dispositifs a ses propres spécificités qui permettent de travailler dans un domaine plus ou moins étendu de temps de séjour, de pression et de température et permet d'accéder à différentes grandeurs expérimentales (délais d'auto-inflammation, concentration, ...) (tableau III.1).

Dispositif expérimental	Température (K)	Pression (bar)	Temps de séjour	Grandeurs accessibles
moteur	>1000	>10	3 ms (Formule1) 12 ms	Pression, polluants émis
Machine à compression rapide	600-2000	5-360 [1]	1 ms à quelques centaines de ms	Délais d'auto-inflammation, concentration des produits
Tube à choc	600-5000	1-1000 [2]	<1 ms	Délais d'auto-inflammation, concentration des produits
Réacteur à écoulement piston	300-1500	1-100 [3]	20 ms à quelques secondes	concentration des produits
Réacteur parfaitement agité	300-150	1-40	15 ms à quelques secondes	concentration des produits

Tableau III.1: Caractéristiques des différents réacteurs utilisés dans les études d'oxydation des hydrocarbures

Les réacteurs agités ont été très tôt utilisés pour les travaux en combustion, la première étude émanant de Longweill et Weiss [4] en 1955 concerne les vitesses de réactions de combustion d'un solvant pétrolier. Le principe de ces réacteurs sera décrit dans la première partie de ce chapitre.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

De nombreuses études ont été entreprises dans le réacteur auto-agité par jets gazeux d'Orléans. Ces travaux se sont intéressés à l'oxydation d'une large variété d'hydrocarbures (alcanes C_1 à C_{16}, aromatiques,...) et ce dans un large domaine de température et de pression. A ce réacteur est associée une chaîne analytique permettant de déterminer la composition des gaz de réaction. Celle-ci sera décrite dans le 3ème volet de ce chapitre.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

1. Le réacteur auto-agité par jets gazeux

1.1 Principe des réacteurs parfaitement agité

Dans un réacteur ouvert agité, l'état instantané du milieu réactionnel est parfaitement uniforme dans l'ensemble de l'enceinte réactionnelle. Cette condition est respectée lorsque le temps de mélange des réactifs et le temps nécessaire à une molécule pour parcourir la distance séparant 2 points quelconques du réacteur sont infiniment faibles devant le temps de passage τ, défini comme le rapport du volume du réacteur par le débit volumique (Équation III.1).

$$\tau = \frac{V_r}{Q_e} \qquad \text{Équation III.1}$$

Lorsque ces conditions sont respectées, le volume prélevé en sortie de réacteur possède alors la même composition instantanée que le milieu réactionnel, et les transformations se déroulant dans le volume réactionnel sont uniquement régies par des processus chimiques.

Au sein de ces réacteurs, seul le temps de passage peut être précisément calculé. Le temps de séjour t_S peut théoriquement prendre une valeur quelconque, dont la distribution théorique $E(t_S)$ (en considérant le fluide comme incompressible) est donnée par l'équation III.1 [5].

$$E(t_s) = \frac{1}{\tau} e^{-\frac{t_s}{\tau}} \qquad \text{Équation III.2}$$

Dans ces conditions idéales, le temps de séjour moyen $\bar{t}_s$ est exactement égal au temps de passage τ.

$$\bar{t}_s = \int_0^{\infty} t_s E(t_s) d\, t_s \qquad \text{Équation III.3}$$

1.2 Description du réacteur auto-agité

Le réacteur (Figure III.1) utilisé a été mis au point par Dagaut *et al.* [6] selon les recommandations des chercheurs de l'Institut Polytechnique de Lorraine Matras, David et Villermaux [7, 8], qui ont défini les conditions de réalisation et de fonctionnement d'un réacteur auto-agité par jets gazeux. Le réacteur ainsi construit au LCSR est parfaitement agité pour des temps compris entre 10 ms et quelques secondes.

L'ensemble du dispositif expérimental est représenté sur la figure III.2.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Figure III.1: Le réacteur auto-agité par jets gazeux

a) Le réacteur

Le réacteur utilisé est une sphère de faible volume (39 cm^3) en silice fondue (afin de limiter les réactions aux parois). Dans la demi-sphère haute du réacteur sont situés 4 injecteurs de diamètre interne 1 mm. Ces injecteurs, dont les orifices de sortie sont situés dans le plan équatorial du réacteur, sont opposés deux à deux assurant ainsi une bonne homogénéisation du mélange réactionnel. D'autre part la forme originale de ces injecteurs autorise le déplacement d'un ensemble sonde de prélèvement-thermocouple le long de la totalité de l'axe vertical, permettant ainsi de vérifier l'homogénéité en température et concentration du mélange gazeux.

Le réacteur est placé dans un four (deux éléments chauffants « Thermocoax ») permettant d'étudier la cinétique de réaction jusqu'à 1300 K. Cet ensemble réacteur-four est lui-même localisé au sein d'une enceinte pressurisable permettant de travailler à haute pression (40 atm maximum). L'équilibre en pression entre l''intérieur et l'extérieur du réacteur est assuré par un débit d'azote contrôlé dans la partie externe et régulé par une électrovanne. La température est mesurée grâce à un thermocouple Pt/Pt-Rh 10% enchâssé au sein d'une fine gaine de quartz (pour éviter les réactions catalytiques en surface). Au sein de cette gaine les fils sont électriquement isolés au moyen d'un capillaire en quartz. Les profils de température relevés montrent que la variation en température au sein du réacteur est inférieure à 10 K.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Le cœur du dispositif utilisé, que nous venons de décrire, est précédé d'un système de préchauffage des gaz et d'un ensemble atomiseur-vaporisateur.

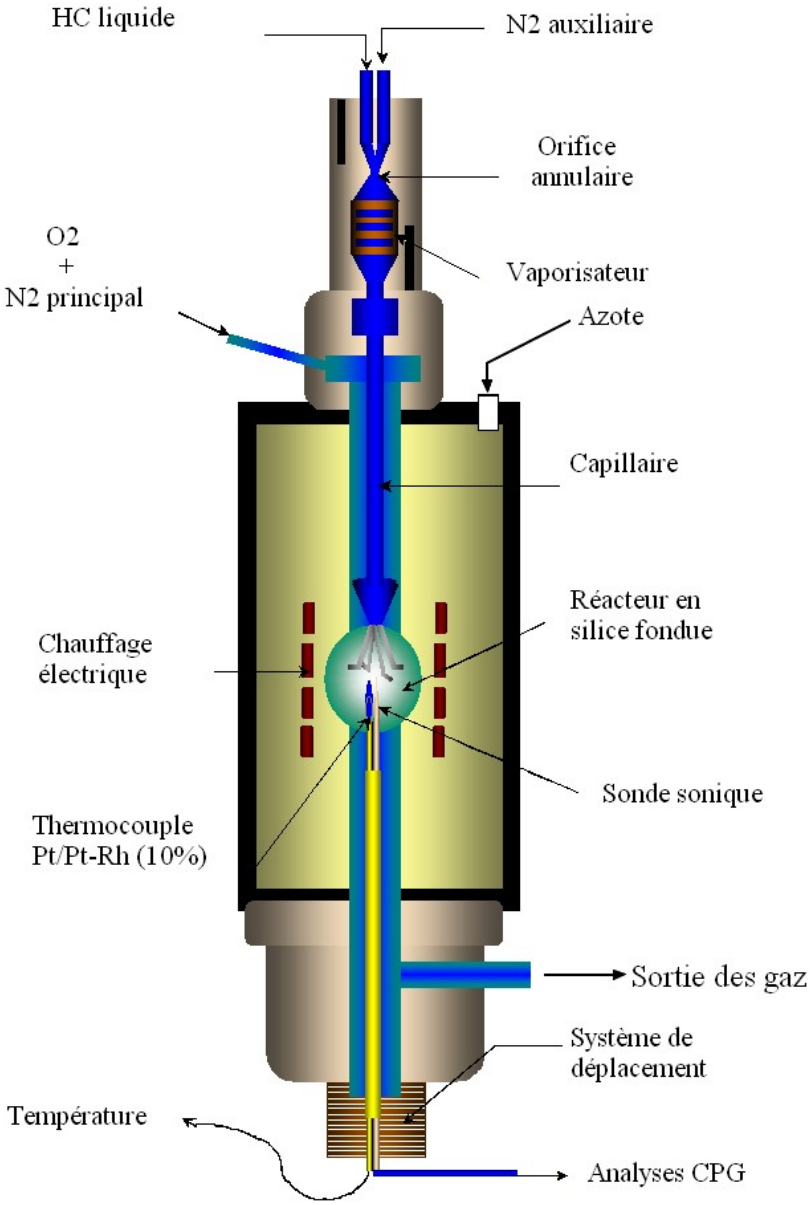


Figure III.2: Le réacteur et son environnement

b) Introduction des réactifs

Le dispositif de préchauffage permet d'amener avant leur entrée dans le réacteur l'ensemble des composés gazeux à une température proche de celle du réacteur, ce qui permet de minimiser les différences de température en son sein, et donc de favoriser l'homogénéisation en température.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Les hydrocarbures étudiés sont à température et pression ambiante sous forme liquide. Il est donc nécessaire pour étudier leur oxydation en réacteur de les injecter sous forme gazeuse. A cette fin, l'hydrocarbure sous forme liquide est acheminé grâce à une pompe HPLC jusqu'à un ensemble atomiseur-vaporisateur où il est dans un premier temps atomisé (brumisé) grâce à un flux d'azote (que l'on qualifie d'auxiliaire), et ce brouillard d'hydrocarbure est ensuite vaporisé par chauffage de la chambre d'atomisation. Ce flux gazeux azote-hydrocarbure est ensuite admis dans un capillaire en quartz (maintenu à une température supérieure au point d'ébullition de l'hydrocarbure) jusqu'à l'entrée du réacteur où il rencontrera un flux d'azote-oxygène, acheminé quant à lui à l'extérieur de ce capillaire.

Les flux d'azote (qualifié de principal car représentant au minimum 70% du flux d'azote total) et d'oxygène sont régulés à l'aide de débitmètres massiques et acheminés jusqu'au réacteur par un circuit parallèle à celui de l'hydrocarbure pour éviter toute réaction prématurée en amont du réacteur. Ces gaz sont également préchauffés.

c) *Prélèvement et échantillonnage*

Après avoir décrit le système situé en amont du réacteur, nous nous intéressons maintenant au dispositif localisé en aval et qui permet l'échantillonnage des gaz de réaction. Comme décrit plus haut, une sonde sonique mobile permet de faire des prélèvements selon l'axe vertical du réacteur. Cette sonde est reliée à une rampe de prélèvement via une ligne de transfert chauffée. La totalité de ce circuit est maintenu sous vide sans pour autant perturber les réactions dans le réacteur. Lors du prélèvement, le pompage est réduit, et la pression dans le circuit de prélèvement tend alors à s'équilibrer avec celle régnant dans le réacteur. L'échantillonnage réalisé à une pression voisine de 50 torrs permet d'assurer un figeage des réactions, nous assurant ainsi que l'échantillon prélevé est représentatif de la composition des gaz dans le réacteur. Cet échantillon est alors soit injecté directement dans un chromatographe permettant une analyse directe de la phase gazeuse, soit stocké dans des ballons en Pyrex à température ambiante pour être analysé ultérieurement.

2. Calcul des débits

Le réacteur auto-agité permet de travailler dans deux configurations différentes:

- à température constante et temps de passage variable
- à temps de passage constant et température variable

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Quelle que soit la configuration choisie, il est nécessaire de calculer les débits volumiques des différents constituants du mélange gazeux, qui sont l'azote, l'oxygène et l'hydrocarbure liquide dans notre cas.

Les débits sont calculés au moyen de la relation liant volume du réacteur V_R, débit total à l'entrée Q_e, temps de séjour moyen $\bar{t}_s$, pression de travail P, température de travail T, pression ambiante P_0 et température ambiante T_0 telle qu'indiquée par l'équation III.4 [5] (dans le cas où le diluant est en large excès par rapport aux réactifs).

$$\bar{t}_s = \frac{V_r}{Q_S} \equiv \frac{V_r}{Q_e}\left(\frac{T_0}{T}\right)\left(\frac{P}{P_0}\right) \qquad \text{Équation III.4}$$

Connaissant la composition initiale du mélange étudié, le temps de séjour moyen, la température et la pression, qui sont des paramètres fixés par l'expérimentateur, il est aisé de déterminer les débits gazeux pour chaque constituant i (Équation III.5).

$$Q_{i,e} = X_{i,e} Q_e = X_{i,e} \frac{V_r}{\bar{t}_s}\left(\frac{T_0}{T}\right)\left(\frac{P}{P_0}\right) \qquad \text{Équation III.5}$$

Concernant l'hydrocarbure il est nécessaire de déterminer un débit liquide à partir du débit gazeux déterminé précédemment, ce qui est réalisé au moyen de l'équation III.6.

$$Q_{HC,l} = X_{HC,0} \frac{V_r}{\bar{t}_s} \frac{P}{T} \frac{M_{HC}}{\rho_{HC} R} \qquad \text{Équation III.6}$$

Les débits calculés sont ensuite contrôlés au cours des expériences par des débitmètres massiques pour les composés gazeux et par une pompe HPLC pour les hydrocarbures liquides.

3. Analyse des gaz

Les échantillons prélevés au cours des expériences sont analysés par chromatographie en phase gazeuse à l'aide de plusieurs chromatographes. Ces chromatographes sont chacun équipés de différentes colonnes et détecteurs (cf. Annexe 1), nous donnant accès une large gamme de produits identifiables, et/ou quantifiables.

La chromatographie est une technique d'analyse qui permet la séparation des constituants d'un mélange selon leur affinité respective entre la phase mobile (gaz vecteur) et la phase stationnaire (colonne). Ces constituants parcourent la colonne en un temps caractéristique, appelé temps de rétention et qui dépend des conditions de température appliquées lors de l'analyse. Ce système de

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

séparation est précédé d'un système d'injection des gaz (boucle d'injection) et suivi d'un détecteur, permettant de déterminer le temps de rétention des composés et de les quantifier après étalonnage.

3.1 Analyse des composés hydrocarbonés.

Les produits d'oxydation intermédiaires ont été dosés à l'aide de 2 chromatographes équipés d'un détecteur à ionisation de flamme (FID). Le premier chromatographe (n°1) est équipé d'une colonne CP-Al_2O_3/KCl permettant la détection des composés comportant de 1 à 6 atomes de carbone (de CH_4 jusqu'au benzène). Le deuxième chromatographe (n°2) comporte une colonne DB624 autorisant non seulement la détection des hydrocarbures mais également celle des composés oxygénés.

La quantification des espèces détectées en FID nécessite un étalonnage préalable, permettant de relier le signal détecté (exprimé en unités arbitraires et correspondant à l'aire du pic chromatographique). Cet étalonnage externe est effectué à partir d'étalons gazeux (commerciaux ou réalisés manuellement) pour les composés majoritaires. Pour les autres espèces le coefficient de réponse a été déterminé à partir de la règle du nombre de carbone effectif (ECN) [9] et des coefficients de réponse de composés de structure chimique voisine.

3.2 Analyse de l'hydrogène

L'hydrogène est dosé au moyen d'un chromatographe (n°3) équipé d'une colonne CP-CarboPLOT P7 et d'un détecteur à conductibilité thermique (TCD). Le gaz vecteur utilisé est l'azote et non l'hélium comme pour les autres chromatographes car H_2 et He ont une conductibilité thermique trop proche ($54{,}3.10^5$ et $41{,}6.10^5$ $cal.cm^{-1}.s^{-1}.K^{-1}$ à 100°C respectivement, contre $7{,}5.10^5$ pour l'azote).

3.3 Analyse des espèces O_2, CO, CO_2, CH_2O

Le chromatographe (n°4) utilisé (Figure III.3) pour cette analyse est équipé d'une colonne CP-Poraplot U (colonne 1) et d'un tamis moléculaire CP-Molseive 5Å (colonne 2). L'analyse avec ce chromatographe se déroule de la manière suivante:

t=0 l'échantillon est introduit dans la boucle d'injection, V1 et V2 sont respectivement dans les positions Bflush et Series

t = 0,1 mn la valve V1 pivote (position Inject): l'échantillon est entraîné par le gaz vecteur 1 et traverse la colonne 1 qui ne retient pas H_2, O_2, N_2, CO et CH_4. Ces 5 composés sont envoyés vers la colonne 2 où ils sont stockés.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

t = 3,2 mn V2 pivote à son tour (position Bypass), court-circuitant la colonne 2 qui est alors isolé du circuit. Les gaz retenus sur la colonne 1 sont alors élués et envoyés vers le détecteur.

t = 20 mn V1 et V2 reviennent dans leur position initiale (Bflush et Series). La colonne 1 est balayée en sens inverse par le gaz vecteur 1 pour éluer les composés restés piégés (backflush) et la colonne 2 est parcourue par le gaz vecteur 2 qui entraîne les composés stockés précédemment vers le détecteur.

t = 33 mn l'analyse est terminée

Le détecteur associé à ce chromatographe est constitué d'un détecteur à conductibilité thermique, d'un méthaniseur et d'un FID montés en série. Le TCD permet la détection de l'oxygène et de l'azote. Le méthaniseur convertit CO et CO_2 en méthane (réduction par H_2 sur catalyseur Ni de Raney), espèce détectable (comme les autres hydrocarbures) par le détecteur FID. Un exemple typique de chromatogramme obtenu lors d'une analyse est représenté ci-dessous (figure III.4).

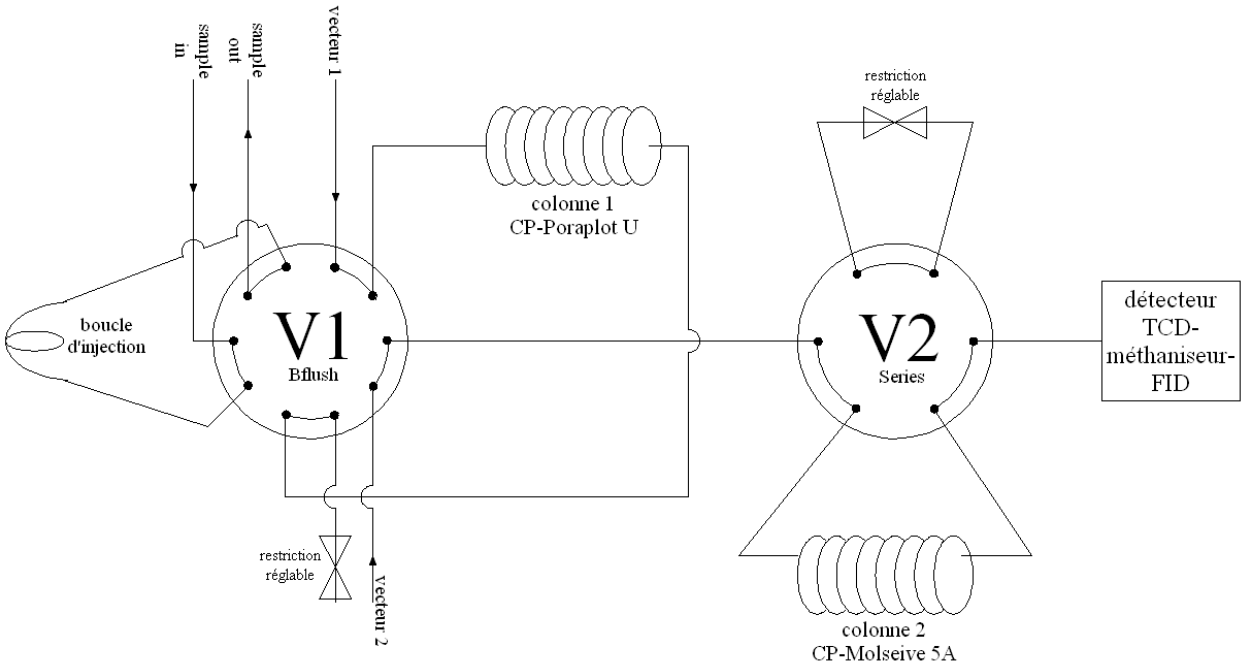


Figure III.3: Schéma du système chromatographique à 2 colonnes

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

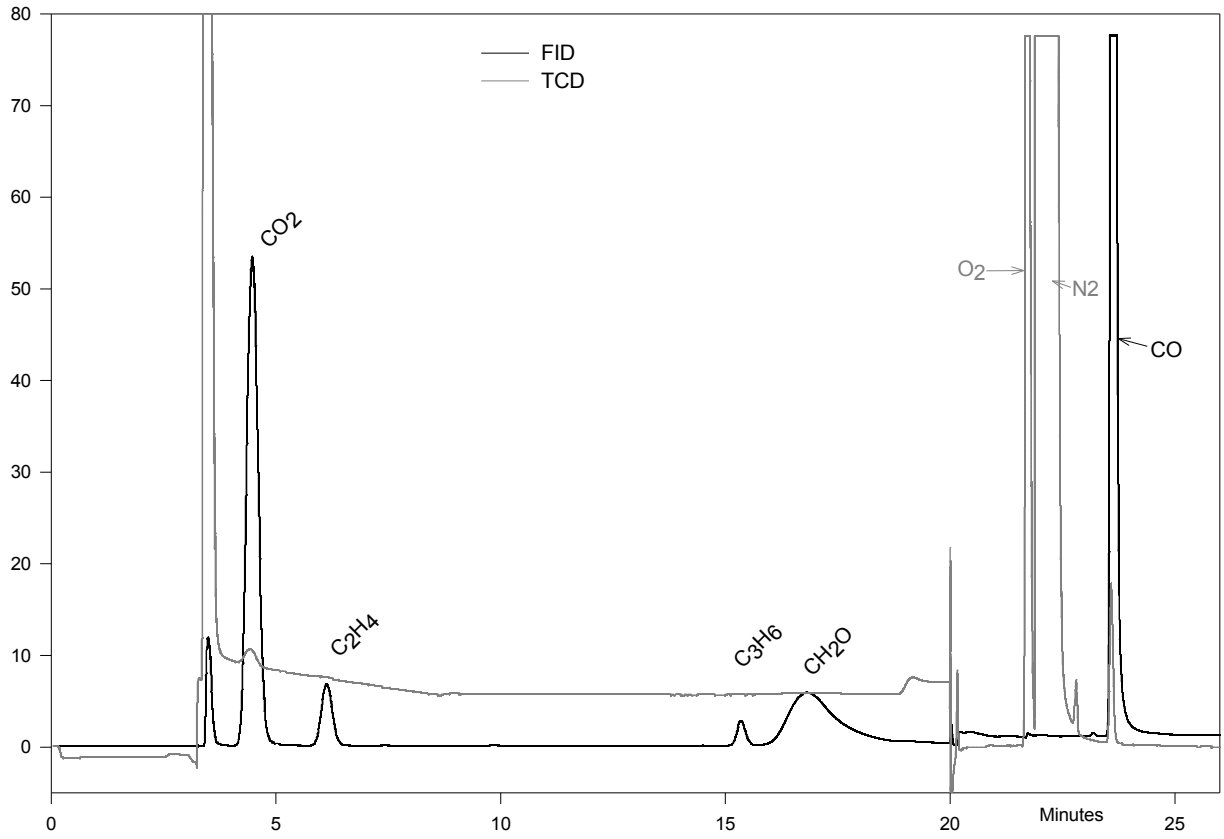


Figure III.4: Exemple de chromatogramme obtenu lors de l'analyse des gaz permanents (O_2, CO, CO_2, N_2) et du formaldéhyde.

3.4 *Analyse des produits lourds*

L'analyse des produits condensables (taille supérieure à 9 atomes de carbone) est réalisée sur un chromatographe relié directement au circuit de prélèvement des gaz de réaction. Il est équipé d'une colonne DB5MS et d'un détecteur FID permettant l'analyse des composés hydrocarbonés.

3.5 *Analyse qualitative : spectrométrie de masse*

Les composés étudiés forment de nombreux produits intermédiaires d'oxydation, certains spécifiques aux molécules étudiées. Ces produits, séparés et observés lors des analyses chromatographiques, ont pu être identifiés grâce à des analyses par spectrométrie de masse. En effet les chromatographes 2 et 5 décrits précédemment peuvent être associés à un détecteur de masse (respectivement un détecteur de masse quadripolaire et un détecteur de type trappe à ions). Les spectres de masse des composés élués ont été acquis dans des conditions d'ionisation standards (E=70 eV), autorisant la comparaison avec les bibliothèques informatiques de spectres de masse.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

4. Incertitudes

Les données expérimentales obtenues en réacteur auto-agité sont destinées à être utilisées pour la validation de modèles cinétiques détaillées. Il est donc nécessaire d'estimer l'incertitude associée à ces résultats afin de pouvoir relativiser la précision des modèles.

Les incertitudes expérimentales ont 2 sources majeures:

- le dispositif expérimental
- le système analytique

La composition réelle du mélange gazeux introduit dans le réacteur est dépendante des débits imposés en azote, oxygène et hydrocarbure. Ainsi, malgré la précision des dispositifs de contrôle, il n'est pas possible d'appliquer les débits théoriquement nécessaires pour obtenir la composition initialement souhaitée. Les débitmètres utilisés ont été étalonnés (coefficient de corrélation des courbes d'étalonnage supérieurs à 0,995) mais il subsiste toujours une erreur liée à la conversion des débits en tensions de consigne. D'autre part, malgré toutes les précautions prises, il est difficile d'assurer une température parfaitement homogène dans l'ensemble du réacteur: la température varie au maximum de 5 K dans l'ensemble du réacteur. Ces incertitudes sur la température et la composition du mélange gazeux se répercutent ensuite sur le temps de passage et au final sur la composition des gaz en sortie de réacteur.

Concernant le dispositif d'analyse, la principale source d'erreur provient des facteurs de réponse. Pour les réactifs, produits et espèces communes à l'ensemble des hydrocarbures, les coefficients de réponse ont été obtenu par étalonnage externe. Les courbes d'étalonnage obtenues ont des coefficients de corrélation supérieurs à 0,996. Pour les autres composés, les coefficients ont été obtenus par des corrélations (règle du carbone effectif) entre hydrocarbures, induisant une plus grande incertitude sur la détermination de la concentration de ces produits. La résolution des chromatogrammes est également une source d'incertitude. Malgré le choix de programmations de température adaptées, la séparation de certains pics n'était pas optimale, rendant plus délicat l'intégration des pics concernés.

En tenant compte de tous ces paramètres, on peut estimer l'incertitude globale comme égale au maximum à 15%.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

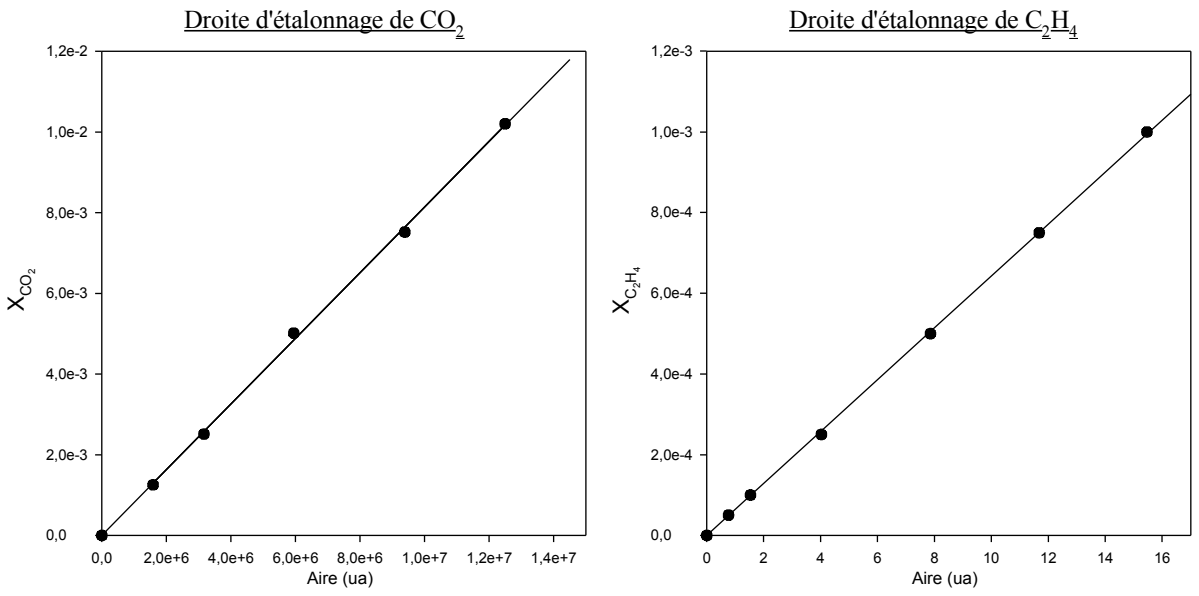


Figure III.5: Exemples de courbes d'étalonnage.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

CONCLUSION

Le réacteur auto-agité par jets gazeux s'avère être un outil efficace pour l'étude de la cinétique chimique de réactions telles que la combustion des hydrocarbures. Pouvant fonctionner dans deux configurations distinctes (température ou temps de passage constant), il permet de travailler dans des conditions dans lesquelles le mélange gazeux est uniforme (en pression, température et composition) et donc de prélever des échantillons représentatifs du milieu réactionnel.

La composition de ces échantillons, rendus non réactifs par abaissement de la pression, peut ensuite être déterminée à l'aide de différentes techniques analytiques, comme la chromatographie en phase gazeuse. Les résultats obtenus pourront ensuite être utilisés pour la validation de modèles cinétiques adaptés aux différents composés étudiés.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

© 2009 Tous droits réservés.

http://doc.univ-lille1.fr

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

[1] S. B. Gupta, B. Bihari, R. Sekar, G. M. Klett and M. Ghaffarpour

Ignition characteristics of methane-air mixtures at elevated temperatures and pressures, SAE Transactions Journal of Fuels 2005

[2] R. S. Tranter, K. Brezinsky and D. Fulle

Design of a high-pressure single pulse shock tube for chemical kinetic investigations, Review of Scientific Instruments, 2001, vol.72, pp. 3046-3054

[3] Combustion and Harmful Emission Control (CHEC) Research Centre

http://www.dtu.dk/centre/CHEC/Research/Combustion%20and%20Harmful%20Emission%20Control/HighTemperature%20Homogeneous%20Recation.aspx

[4] J. P. Longwell and M. A. Weiss

High temperature reaction rates in hydrocarbon combustion, Industrial and Engineering Chemistry, 1955, vol. 47, pp. 1434-1643

[5] J. Villermaux

Réacteurs chimiques, Techniques de l'Ingénieur

[6] P. Dagaut, M. Cathonnet, J-P. Rouan, R. Foulatier, A. Quilgars, J-C. Boettner, F. Gaillard and H. James

A Jet-Sirred Reactor for kinetic studies of homogeneous gas-phase reactions at pressure up to ten atmospheres (1 Mpa), Journal of Physics E: Scientific Instruments, 1986, vol. 19, pp. 207-209

[7] D. Matras et J. Villermaux

Un réacteur continu parfaitement agité par jets gazeux pour l'étude de la cinétique de réactions rapides, Chemical Engineering Science, 1973, vol. 28, pp. 129

[8] R. David et D. Matras

Règles de construction et d'extrapolation des réacteurs auto-agités par jets gazeux, Canadian Journal of Chemical Engineering, 1975, vol. 53, pp. 297-300

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[9] J. Tranchant

Manuel pratique de chromatographie en phase gazeuse, MASSON, 1982

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

CHAPITRE IV : ÉTUDE EXPÉRIMENTALE EN RÉACTEUR AUTO-AGITÉ

Introduction 119

1. Résultats expérimentaux 121

1.1 Oxydation du n-décane 121

a) conditions expérimentales 121

b) résultats expérimentaux 122

1.2 Oxydation du n-propylcyclohexane 125

a) conditions expérimentales 125

b) résultats expérimentaux 126

1.3 Oxydation du n-butylbenzène 129

a) conditions expérimentales 129

b) résultats expérimentaux 129

1.4 Oxydation du mélange n-décane/n-propylcyclohexane 135

a) conditions expérimentales 135

b) résultats expérimentaux 135

1.5 Oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène 141

a) conditions expérimentales 141

b) résultats expérimentaux 141

1.6 Oxydation du mélange n-décane/n-propylcyclohexane/n-butylbenzène 147

a) conditions expérimentales 147

b) résultats expérimentaux 147

2. Interactions au sein des mélanges 152

2.1 Détermination de la vitesse de réaction d'un composé 152

2.2 Comparaison des vitesses d'oxydation - Influence des partenaires 153

a) influence de la richesse 153

b) influence des partenaires d'oxydation 155

3. Formation des polluants 158

3.1 Benzène 159

3.2 Buta-1,3-diène 160

3.3 Formaldéhyde 160

3.4 Acétaldéhyde 161

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

3.5 Méthane 162

Conclusion 165

Références bibliographiques 167

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

INTRODUCTION

Au chapitre II nous avons pu voir que les résultats disponibles sur l'oxydation des hydrocarbures étaient fortement disparates selon la famille chimique considérée. Les données disponibles pour les alcanes à chaîne longue sont bien plus nombreuses que celles concernant les alkylcyclohexanes et les alkylbenzènes supérieurs. Il est donc nécessaire de compléter les bases de données expérimentales en s'intéressant à l'oxydation de ces composés dans des conditions proches de celles rencontrées dans les applications industrielles. Il est aussi nécessaire d'étudier l'oxydation des mélanges d'hydrocarbures qui permettent une meilleure représentation du comportement des carburants commerciaux.

Durant cette thèse nous avons étudié en réacteur auto-agité l'oxydation à haute pression du n-décane, du n-propylcyclohexane, du n-butylbenzène ainsi que celle de leurs mélanges binaires et ternaire. Les expériences ont été réalisées avec des mélanges fortement dilués dans un gaz inerte (azote) afin de limiter le dégagement de chaleur dans le réacteur. Le temps de passage des gaz dans le réacteur a été fixé, quels que soient les composés étudiés, à 1 s. Cette durée, qui est comprise dans le domaine où le réacteur est parfaitement agité, permet d'observer convenablement l'oxydation de basse température qui a alors le temps de se développer.

Les résultats obtenus, à savoir les profils de concentration en fonction de la température des réactifs, produits et intermédiaires stables principaux, sont présentés dans une première partie. L'analyse de ces résultats nous a ensuite permis de déterminer les effets réciproques des 3 hydrocarbures et de déterminer l'influence de la composition du mélange sur la production de certains polluants.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

© 2009 Tous droits réservés.

http://doc.univ-lille1.fr

1. Résultats expérimentaux

1.1 Oxydation du n-décane

a) Conditions expérimentales.

L'oxydation du n-décane a déjà fait l'objet de nombreux travaux en réacteur auto-agité. En 1992, Balès-Guéret *et al* [1] étudient l'oxydation du n-décane à pression atmosphérique et à température constante (923 K et 1030 K), le temps de passage étant variable. Quelques années plus tard, Dagaut *et al* [2] obtiennent des résultats (profils d'espèces) à 10 bar sur un large domaine de température et de richesse. En 2006, Dagaut *et al* [3] compléteront l'étude de l'oxydation du n-décane en obtenant des résultats similaires à pression atmosphérique.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{décane}$ initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	richesse	Température (K)	référence
1	0-0,22	$1,0.10^{-3}$	$7,75.10^{-2}$	$9,215.10^{-1}$	0,2	923	Balès-Guéret *et al* [1]
1	0-0,22	$1,0.10^{-3}$	$7,75.10^{-2}$	$9,215.10^{-1}$	0,2	1030	
1	0-0,22	$1,0.10^{-3}$	$1,55.10^{-2}$	$9,835.10^{-1}$	1,0	1030	
1	0-0,22	$1,0.10^{-3}$	$1,033.10^{-2}$	$9,8867.10^{-1}$	1,5	1030	
10	0,5	$1,0.10^{-3}$	$1,55.10^{-1}$	$8,440.10^{-1}$	0,1	750-1150	Dagaut *et al* [2]
10	0,5	$1,0.10^{-3}$	$1,55.10^{-2}$	$9,835.10^{-1}$	1,0	750-1150	
10	0,5	$1,0.10^{-3}$	$1,033.10^{-2}$	$9,8867.10^{-1}$	1,5	750-1150	
10	1	$1,0.10^{-3}$	$1,55.10^{-2}$	$9,835.10^{-1}$	1	560-1050	
1	0,07	$7,0.10^{-4}$	$2,17.10^{-2}$	$9,776.10^{-1}$	0,5	900-1350	Dagaut *et al* [3]
1	0,07	$7,0.10^{-4}$	$1,085.10^{-2}$	$9,8845.10^{-1}$	1,0	900-1350	
1	0,07	$7,0.10^{-4}$	$7,233.10^{-3}$	$9,9207.10^{-1}$	1,5	900-1350	
1	0,07	$7,0.10^{-4}$	$5,425.10^{-3}$	$9,9387.10^{-1}$	2,0	900-1350	
10	1	$1,0.10^{-3}$	$6,20.10^{-2}$	$9,370.10^{-1}$	0,25	550-1160	Cette étude
10	1	$1,0.10^{-3}$	$3,10.10^{-2}$	$9,680.10^{-1}$	0,5	550-1160	

Tableau IV.1: Oxydation du n-décane en réacteur auto-agité: conditions expérimentales

Cependant, parmi tous ces résultats, une seule expérience (Dagaut *et al* [2]) a permis d'observer la chimie de d'oxydation de basse température, et uniquement en condition stœchiométrique. Nous

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

avons donc complété ces données en étudiant l'oxydation de basse et haute température du n-décane en milieu pauvre. L'ensemble des conditions expérimentales relatives aux travaux menés en réacteur auto-agité à Orléans est récapitulé dans le tableau IV.1.

b) Résultats expérimentaux

Ces expériences nous ont permis d'obtenir l'évolution en fonction de la température des réactifs, produits et principales espèces intermédiaires. Ces résultats sont représentés sur les figures IV.1 et IV.2.

Parmi les espèces intermédiaires détectées, CO et le formaldéhyde sont les espèces majoritaires. On peut ensuite observer que la production d'alcènes est très importante, comme celle des aldéhydes. On remarque également que le méthane et l'hydrogène sont également produits de manière abondante. Les cétones et les éthers cycliques font partie des produits minoritaires, mais sont tout de même détectés dans des proportions non négligeables.

Si l'on regarde en détail les profils des différents alcènes et aldéhydes on remarque que la quantité produite est inversement proportionnelle à la taille de la chaîne carbonée. On peut aussi noter que cette remarque est également applicable aux différentes cétones détectées.

Concernant le profil de n-décane, on note que l'hydrocarbure initial est rapidement consommé à basse température. La zone de coefficient négatif de température est située entre 620 et 750 K et ne se caractérise pas par une forte diminution de la consommation du décane. Par contre la baisse de réactivité globale du système est bien plus visible sur les profils de CO et CO_2.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

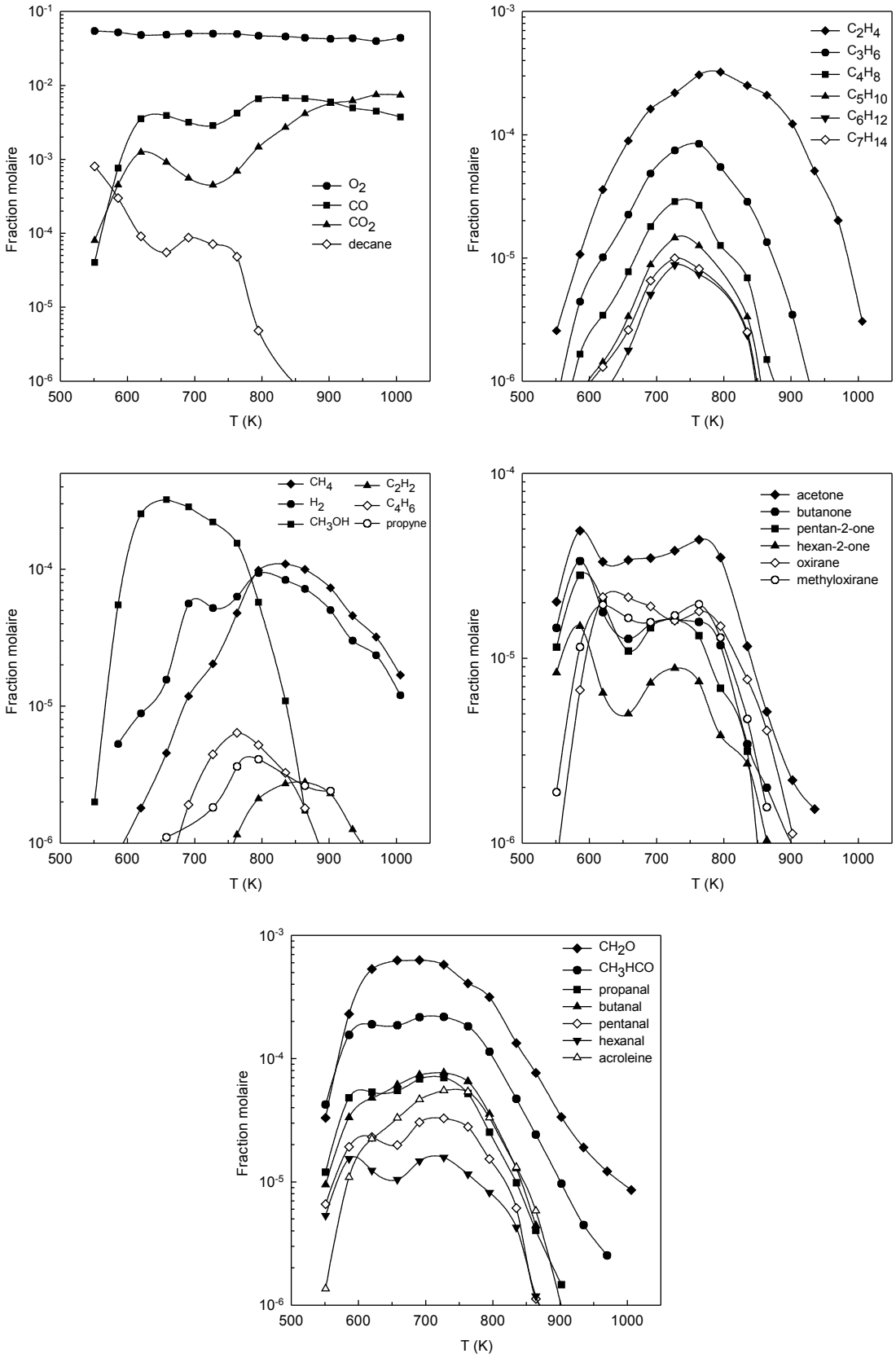


Figure IV.1: Oxydation du n-décane en réacteur auto-agité:
P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

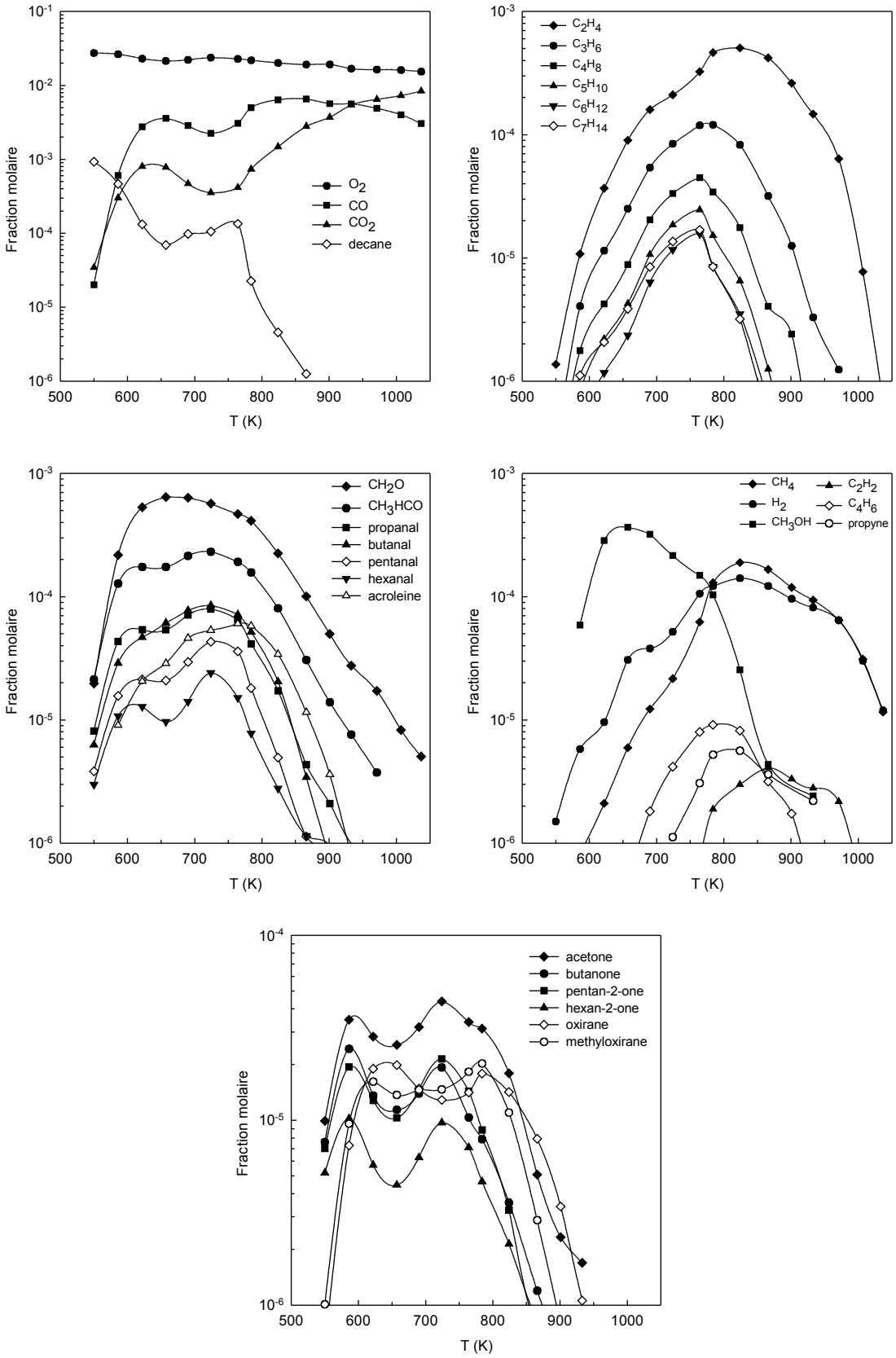


Figure IV.2: Oxydation du n-décane en réacteur auto-agité:
P=10 bar ; φ=0,50 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

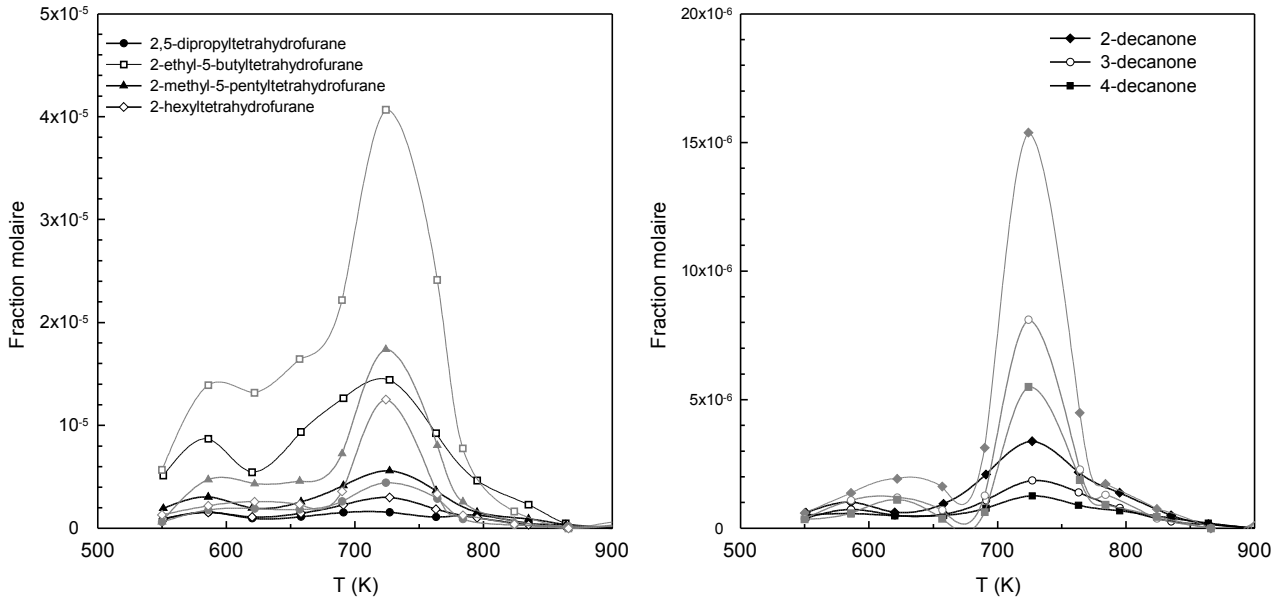


Figure IV.3: Évolution de la fraction molaire des espèces spécifiques de l'oxydation de basse température du n-décane en fonction de la température et de la richesse (en noir φ=0,25 ; en gris φ=0,50)

Les réactions caractéristiques de l'oxydation des alcanes aboutissent généralement à la formation d'éthers cycliques possédant le même nombre d'atomes de carbone que la molécule initiale. Dans le cas présent nous avons pu détecter et quantifier (avec néanmoins une grande incertitude due à une séparation incomplète de ces différents isomères) 4 éthers cycliques dérivés du tétrahydrofurane (ou oxolane). Les profils de concentration en fonction de la température de ces espèces sont représentés sur la figure IV.3. On observe que le 2-éthyl-5-butyltétrahydrofurane et le 2-méthyl-5-pentyltétrahydrofurane sont les 2 espèces majoritaires, ce qui est en accord avec les observations précédentes de Dagaut *et al* [2]. Le pic de concentration pour ces espèces est localisé vers 720 K, ce qui correspond à la fin de la zone de coefficient négatif de température. De même, la valeur de ce maximum dépend de la richesse. Les concentrations détectées augmentent avec cette dernière, ce qui peut s'expliquer par la plus forte réactivité du système aux richesses les plus faibles et la plus forte concentration en oxygène puisque ces composés se forment avant la deuxième addition d'oxygène sur les radicaux hydroperoxyalkyles.

1.2 Oxydation du n-propylcyclohexane

a) Conditions expérimentales

L'oxydation du propylcyclohexane a été précédemment étudiée en réacteur auto-agité à pression atmosphérique par Balès-Guéret *et al* [1] et Ristori [4,5], puis par Mati [6] à haute

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

pression. L'ensemble de ces études ne concerne que l'oxydation de haute température (T>800 K) de cet hydrocarbure. Nous avons ici récolté des résultats en milieu pauvre dans un plus large domaine de température, couvrant celui des flammes froides.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{propylcyclo}$ initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	richesse	Température (K)	référence
1	0-0,22	$1,0.10^{-3}$	$6,75.10^{-2}$	$9,315.10^{-1}$	0,2	923	Balès-Guéret *et al* [1]
1	0-0,22	$1,0.10^{-3}$	$6,75.10^{-2}$	$9,315.10^{-1}$	0,2	1023	
1	0-0,22	$1,0.10^{-3}$	$1,35.10^{-2}$	$9,855.10^{-1}$	1,0	1030	
1	0-0,22	$1,0.10^{-3}$	$9,00.10^{-3}$	$9,900.10^{-1}$	1,5	1030	
1	0,07	$1,0.10^{-3}$	$2.70.10^{-2}$	$9,720.10^{-1}$	0,5	950-1250	Ristori [4,5]
1	0,07	$1,0.10^{-3}$	$1,35.10^{-2}$	$9,855.10^{-1}$	1,0	950-1250	
1	0,07	$1,0.10^{-3}$	$9,00.10^{-3}$	$9,900.10^{-1}$	1,5	950-1250	
10	0,5	$5,0.10^{-4}$	$1,35.10^{-2}$	$9,860.10^{-1}$	0,5	800-1200	Mati [6]
10	0,5	$5,0.10^{-4}$	$6,75.10^{-3}$	$9,9275.10^{-1}$	1,0	800-1200	
10	0,5	$5,0.10^{-4}$	$4,50.10^{-3}$	$9,950.10^{-1}$	1,5	800-1200	
10	0,5	$5,0.10^{-4}$	$3,375.10^{-3}$	$9,9613.10^{-1}$	2,0	800-1200	
10	1	$1,0.10^{-3}$	$5,40.10^{-2}$	$9,450.10^{-1}$	0,25	550-1000	Cette étude

Tableau IV.2: Oxydation du n-propylcyclohexane en réacteur auto-agité: conditions expérimentales

b) Résultats expérimentaux

Les profils de concentration des réactifs, produits et principales espèces intermédiaires de l'oxydation du propylcyclohexane à 10 bar et pour une richesse de 0,25 sont représentés sur la figure IV.5.

Les produits détectés majoritairement sont le monoxyde de carbone, l'éthylène, le formaldéhyde, le propène, le méthane, l'hydrogène, l'acétaldéhyde, le méthanol et le propanal. On remarque qu'aucune de ces espèces n'est spécifique à l'oxydation des naphtènes et correspondent à celles détectées lors des précédentes études sur ce composé. Parmi les espèces cycliques, les composés majoritaires sont le cyclohexène, la cyclohexanone, la cyclohexen-1-one et le benzène. On peut constater que les principaux 1-alcènes produits ont 2 et 3 atomes de carbone ; ceux de taille

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

supérieure sont présents à l'état de trace, ce qui contraste avec les observations faites pour le n-décane.

Les produits d'oxydation de basse température, et notamment les éthers cycliques, n'ont pu être formellement identifiés et les différents isomères distingués. Néanmoins certains isomères des espèces C_9H_{16} ont pu être identifiés comme le propylidènecyclohexane, le 4-propylcyclohexène et le 3-propylcyclohexène dont les profils sont fournis sur la figure IV.4.

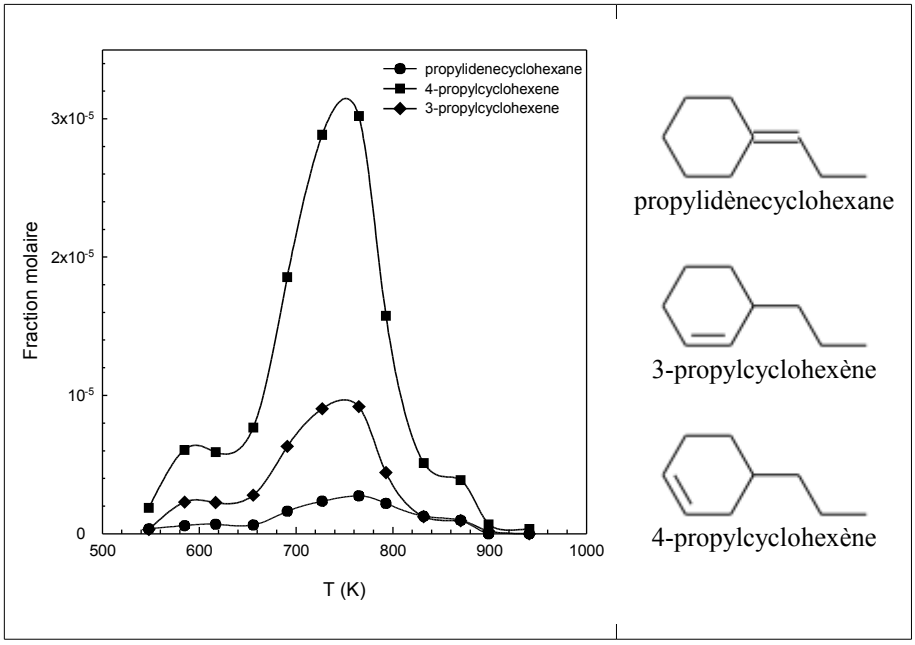


Figure IV.4: Évolution de la concentration des différents isomères C_9H_{16} identifiés lors de l'oxydation du n-propylcyclohexane en réacteur auto-agité (P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%)

On peut également noter la présence en quantité faible mais non négligeable de propylbenzène, qui provient des déshydrogénations successives du cycle carboné initial, comme ont pu le montrer des travaux sur l'oxydation du cyclohexane [7,8] dans lesquels la formation de cyclohexène, cyclohexa-1,3-diène et benzène avait été observée.

Comme observé lors de l'oxydation du décane, le propylcyclohexane est rapidement consommé entre 550 et 620 K tandis qu'apparaît d'importantes quantités de CO et CO_2. Au-delà de cette zone de température la consommation de cet hydrocarbure ralentit jusqu'à 750 K, correspondant à la zone du coefficient négatif de température. Au-delà, la concentration en propylcyclohexane chute rapidement jusqu'à devenir nulle vers 900 K alors que dans le même temps celles des hydrocarbures à un ou 2 atomes de carbone augmentent .

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

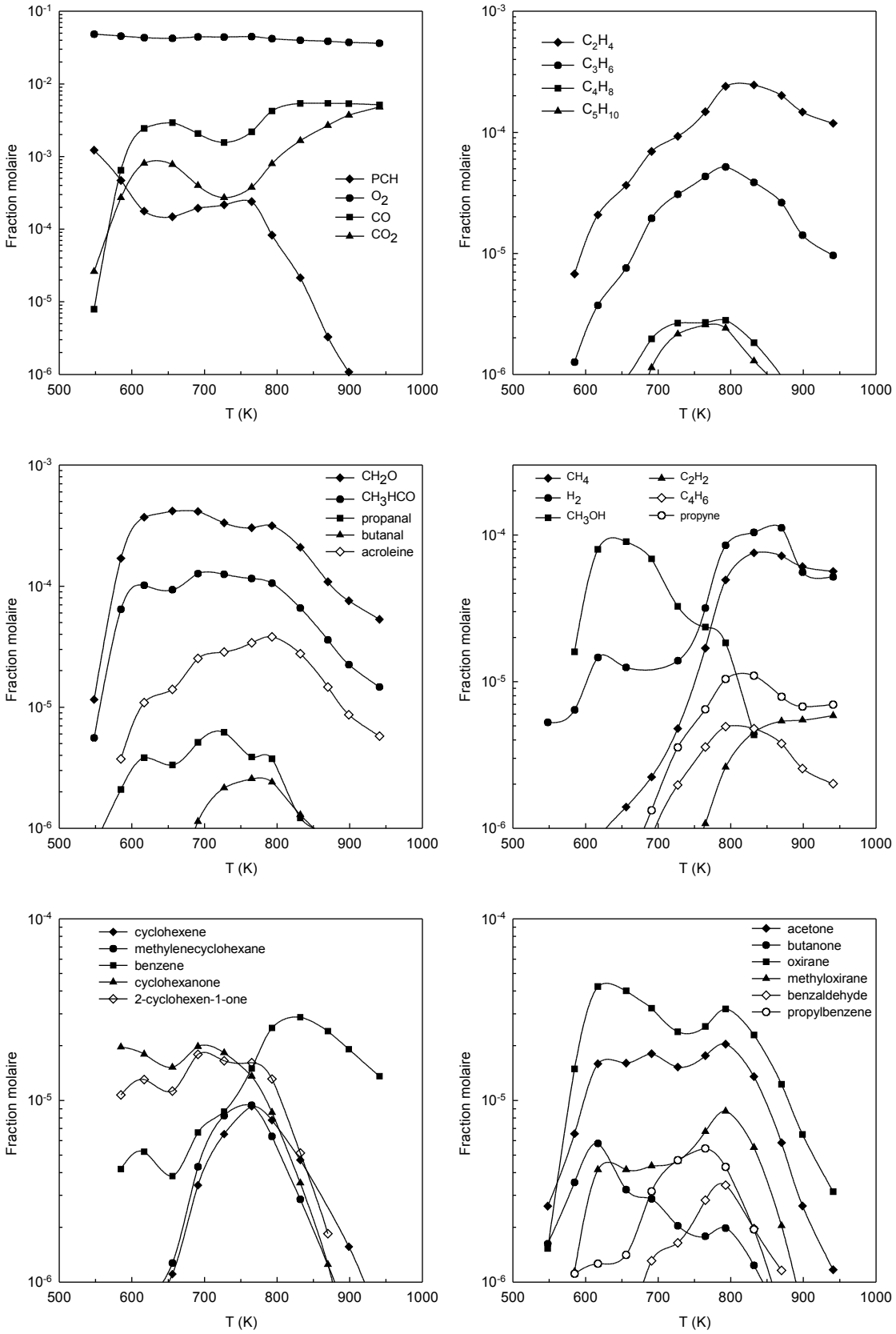


Figure IV.5: Oxydation du n-propylcyclohexane en réacteur auto-agité:
P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

1.3 Oxydation du n-butylbenzène

a) Conditions expérimentales

L'oxydation du n-butylbenzène a été étudiée à haute pression dans un large domaine de température et de richesse, dans les conditions indiquées dans le tableau IV.3.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{butylbenzène}$ initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	richesse	Température (K)	référence
10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$5{,}40.10^{-2}$	$9{,}45010^{-1}$	0,25	550-1150	Cette étude
10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$2{,}705.10^{-2}$	$9{,}720.10^{-1}$	0,50	550-1150	
10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$1{,}35.10^{-2}$	$9{,}855.10^{-1}$	1,00	550-1150	
10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$9{,}00.10^{-3}$	$9{,}900.10^{-1}$	1,50	550-1150	

Tableau IV.3: Oxydation du n-butylbenzène en réacteur auto-agité: conditions expérimentales

b) Résultats expérimentaux

Les différents profils des réactifs, produits et principaux intermédiaires stables sont présentés sur les figures IV.7 à IV.10.

Les espèces intermédiaires majoritaires sont le monoxyde de carbone, l'hydrogène, le méthane, l'éthylène, le propène, le benzène, le styrène, $C_6H_5C_2H_3$, le formaldéhyde, l'acétaldéhyde et le benzaldéhyde C_6H_5CHO. Ces observations sont cohérentes avec celles rapportées par Brezinsky *et al* [9].

Parmi les autres espèces détectées, on peut citer le toluène, l'éthylbenzène, l'acétylène, le buta-1,3-diène, le propyne, l'oxirane, le méthyloxirane, l'acétone, le 2-propénylbenzène (ou allylbenzène). Le phénol a également pu être détecté mais sa quantification n'a pas pu être effectuée suite à des problèmes de séparation durant les analyses chromatographiques.

En observant les profils des réactifs et des espèces CO et CO_2, on peut constater que le butylbenzène subit une oxydation de basse température peu intense comparée à celle du décane et du propylcyclohexane. Celle-ci est localisée entre 550 et 700 K avec un maximum de conversion aux alentours de 615 K. La zone du coefficient négatif de température s'étend depuis cette température jusqu'à 700 K. La consommation du butylbenzène à basse température est fortement dépendante de la concentration en oxygène, si bien qu'à la stœchiométrie et en milieu riche elle

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

devient quasiment inexistante, ce qui se traduit sur les profils d'espèces par une concentration en CO et CO_2 quasi-nulle.

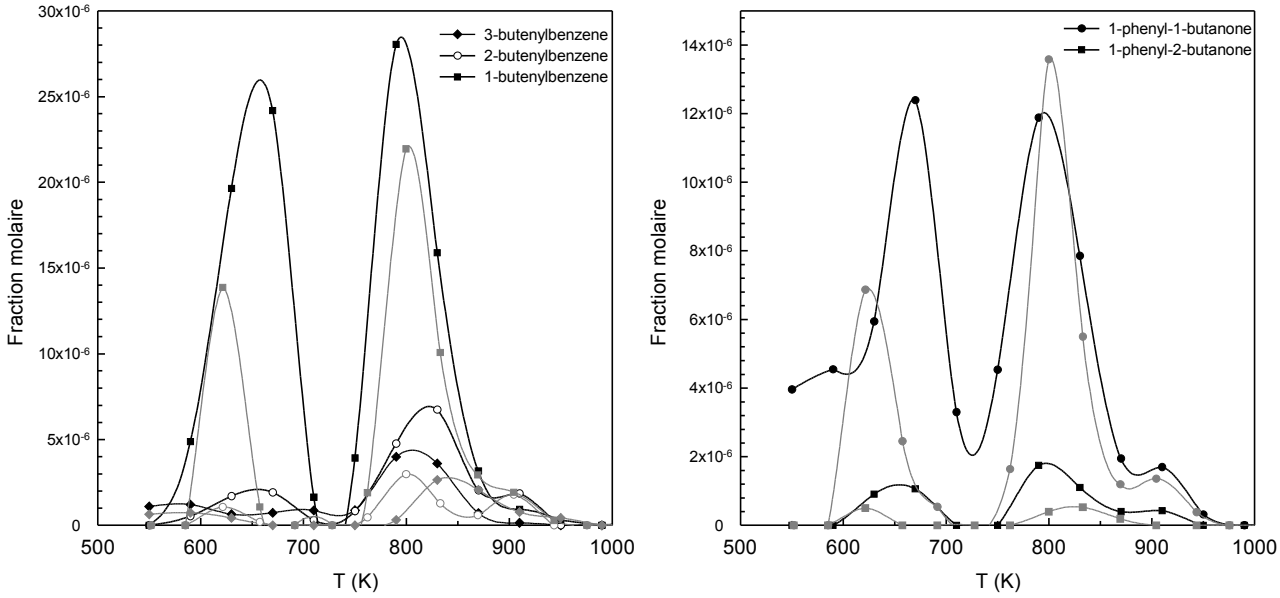


Figure IV.6: Évolution de la fraction molaire des espèces spécifiques à l'oxydation de basse température du n-butylbenzène en fonction de la température et de la richesse (en noir φ=0,25 ; en gris φ=0,50)

Généralement une telle réactivité à basse température est également caractérisée par la formation de composés oxygénés conservant la structure carbonée du réactif initial, tels que des espèces carbonylées et des éthers cycliques, comme c'est le cas pour le décane. Ici la faible consommation du butylbenzène n'a pas permis de détecter/identifier les espèces hétérocycliques mais certaines cétones ont néanmoins pu être observées: la 1-phényl-1-butanone (phénylpropylcétone) et la 1-phényl-2-butanone (benzyléthylcétone). Par ailleurs les 3 isomères du buténylbenzène ont également été détectés et quantifiés, et les résultats montrent que l'isomère dont la double liaison C=C est conjuguée avec le cycle benzénique est majoritaire. Les profils de ces 5 espèces sont représentés sur la figure IV.6

Si l'on s'attarde succinctement sur les aspects mécanistiques de l'oxydation du butylbenzène, qui seront décrits plus en détail dans le chapitre traitant de la modélisation, on peut s'apercevoir que les principales espèces détectées proviennent initialement du radical 1-phényl-1butyle, c'est-à-dire le radical ayant perdu un atome d'hydrogène en position benzylique, qui est la position favorisée étant donné la stabilisation par résonance du cycle benzénique. Ainsi depuis ce radical

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

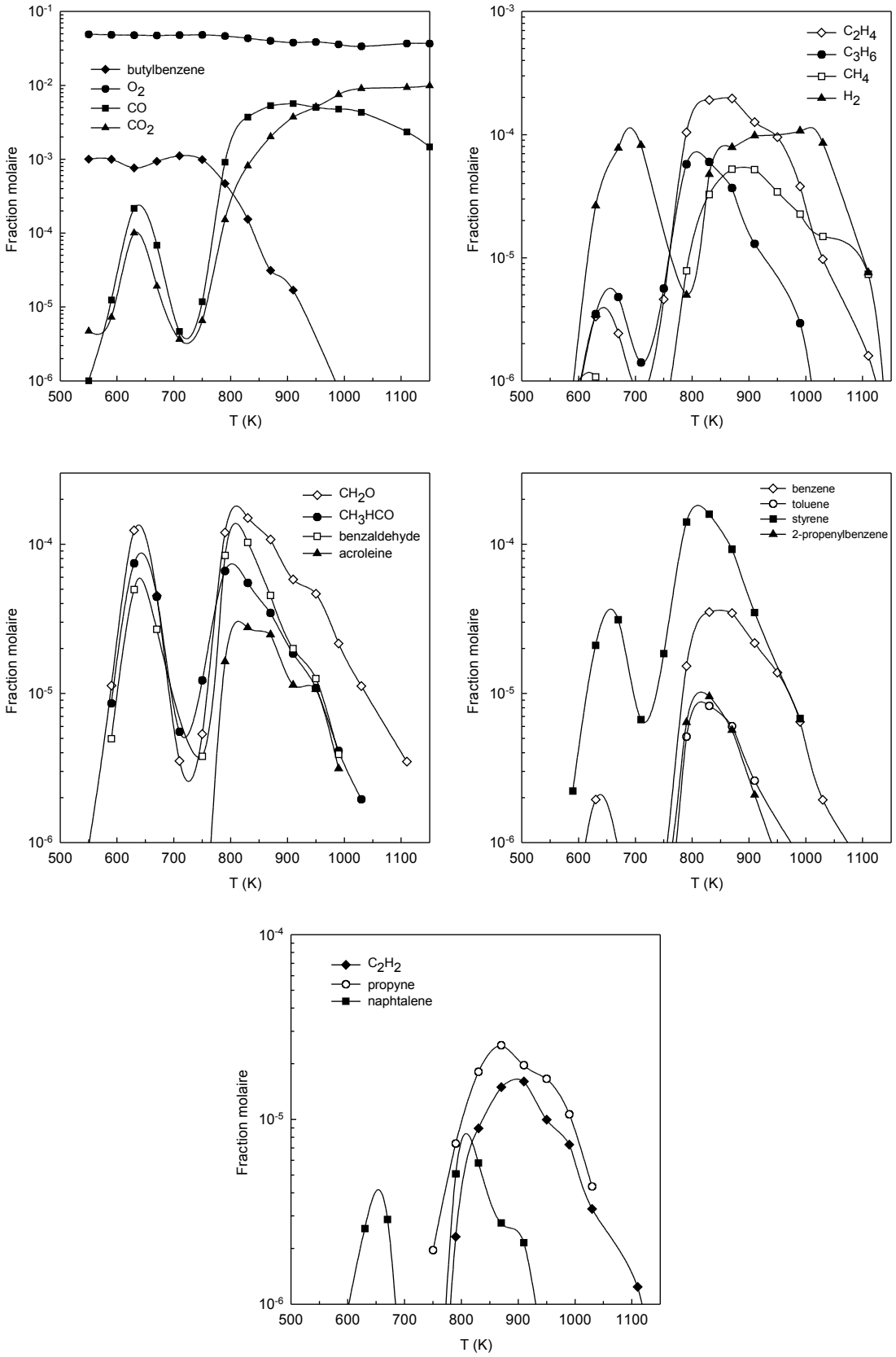


Figure IV.7: Oxydation du n-butylbenzène en réacteur auto-agité:
P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

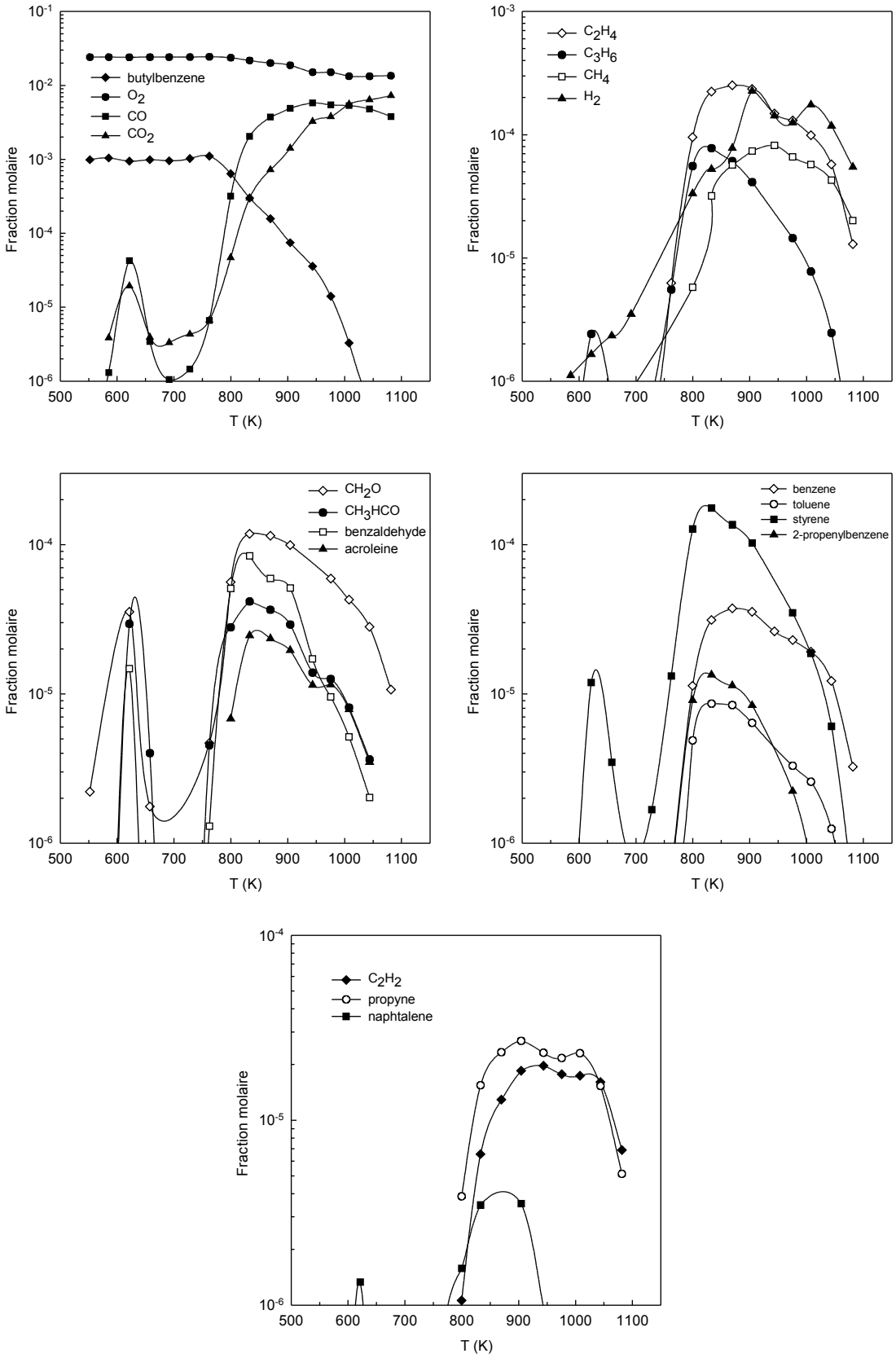


Figure IV.8: Oxydation du n-butylbenzène en réacteur auto-agité:
P=10 bar ; φ=0,50 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

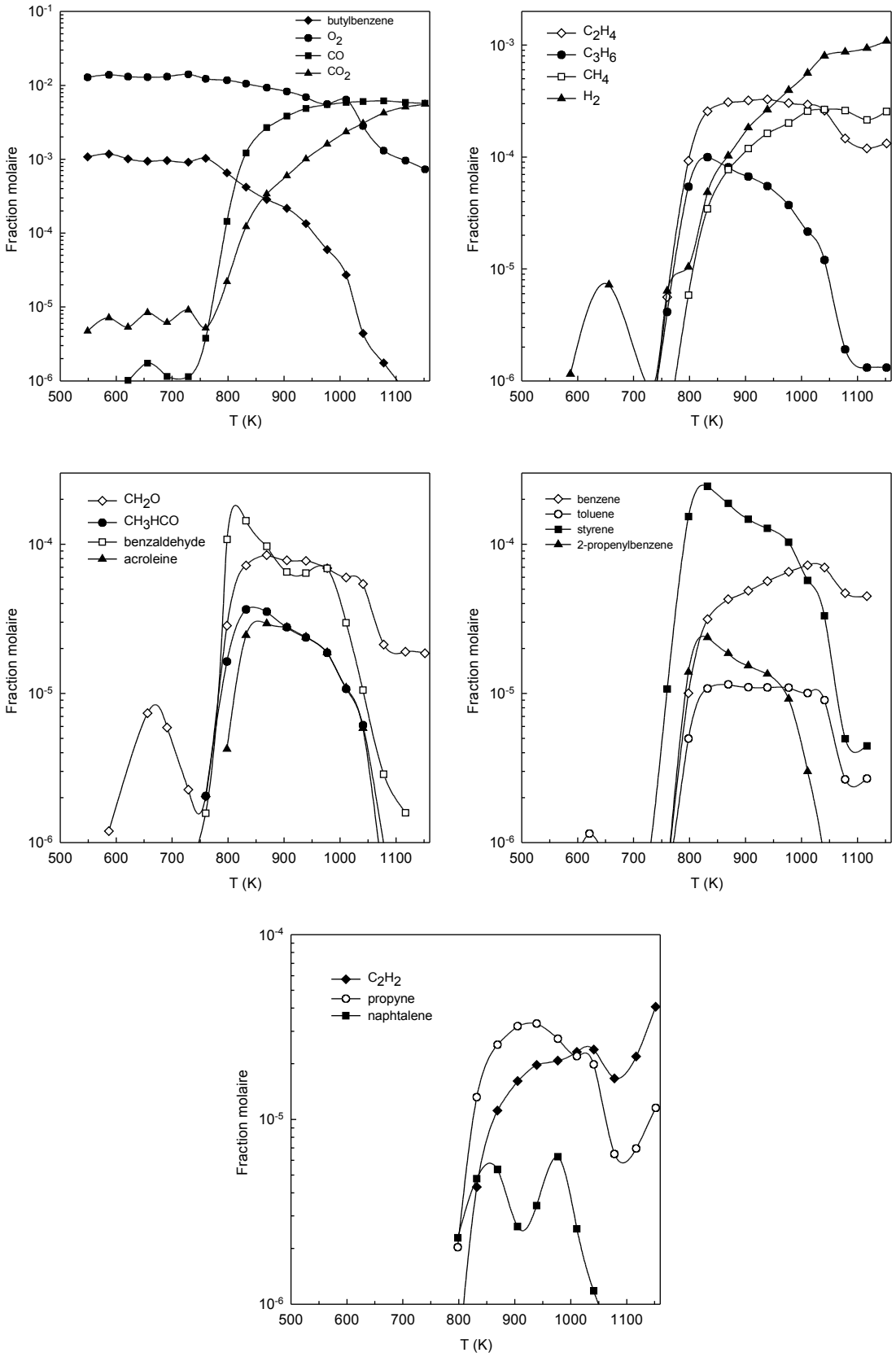


Figure IV.9: Oxydation du n-butylbenzène en réacteur auto-agité:
P=10 bar ; φ=1,00 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

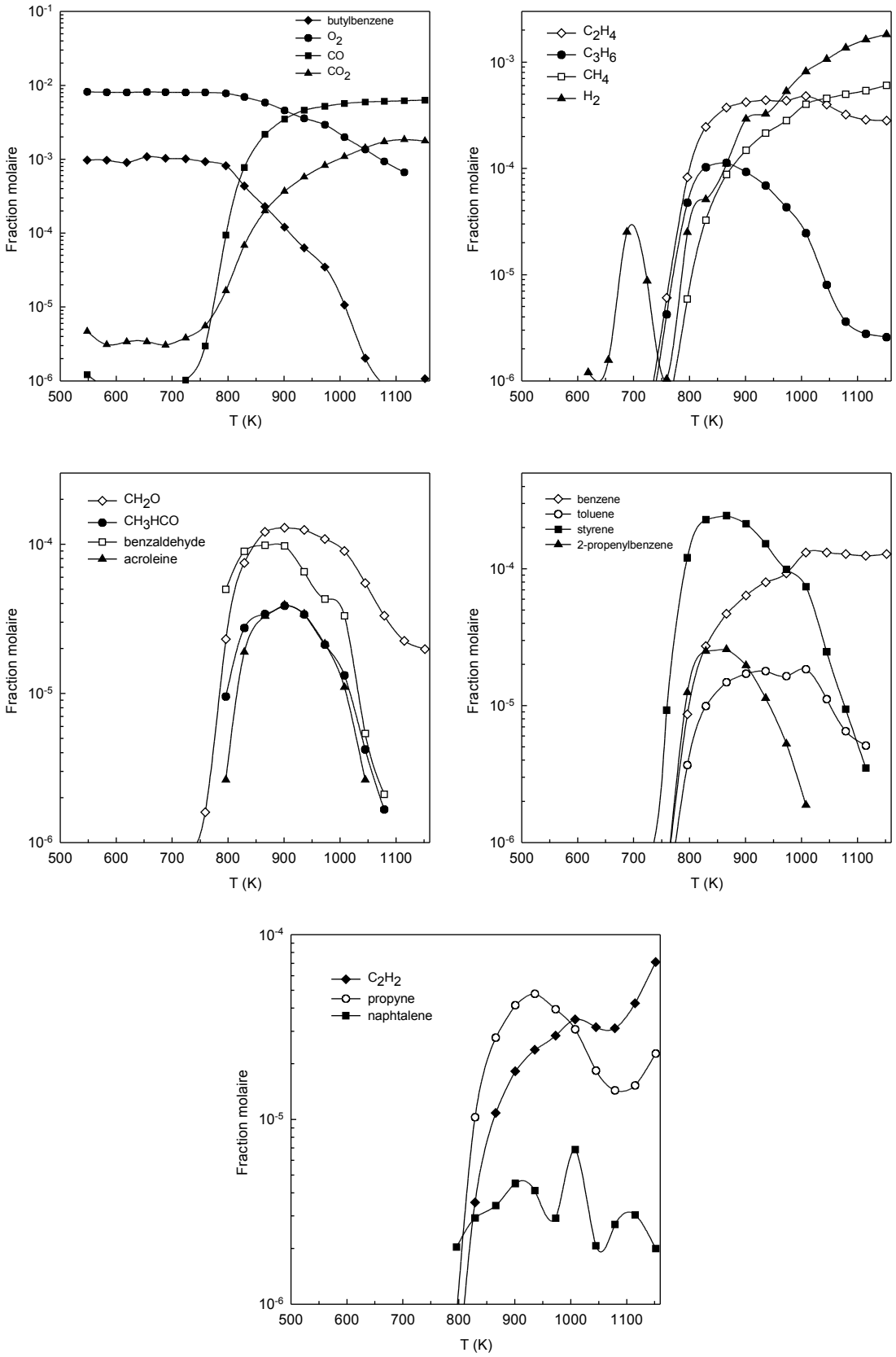


Figure IV.10: Oxydation du n-butylbenzène en réacteur auto-agité:
P=10 bar ; φ=1,50 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

s'explique aisément la formation du styrène et de l'éthylène (rupture C-C formant le styrène et C_2H_5, qui à son tour donnera C_2H_4) et du 1-phényl-1-butène (perte d'hydrogène sur l'atome de carbone en β du cycle) et de la 1-phényl-1-butanone (par addition de ce radical sur l'oxygène et isomérisation de type RO_2=QO_2H)

1.4 Oxydation du mélange n-décane/n-propylcyclohexane

a) Conditions expérimentales

Le mélange étudié est un mélange molaire composé à 60% de n-décane et à 40% de n-propylcyclohexane. Si l'on se réfère au chapitre précédent et à la manière dont sont calculés les débits, on s'aperçoit qu'il est nécessaire de connaître pour ce mélange la masse molaire, le facteur stœchiométrique Z ainsi que la masse volumique ρ.

La masse molaire et le facteur stœchiométrique Z sont facilement calculables connaissant la composition molaire d'un mélange d'hydrocarbures par les équations IV.1 et IV.2.

$$Z_{mélange} = \sum_i X_i \times Z_i \qquad \text{Équation IV.1}$$

$$M_{mélange} = \sum_i X_i \times M_i \qquad \text{Équation IV.2}$$

Quant à la masse volumique ρ, les mélanges étudiés ne sont pas des mélanges idéaux, et par conséquent elle doit être déterminée expérimentalement.

Pour le mélange qui nous concerne, les valeurs suivantes ont été obtenues:

$$M(\text{mélange}) = 135{,}87\ g.mol^{-1}$$
$$Z = 14{,}7$$
$$\rho(\text{mélange},293\ K) \approx 0{,}750\ kg.L^{-1}$$

Nous avons donc pu étudier l'oxydation du mélange décane/propylcyclohexane 60/40 (mole/mole) dans les conditions regroupées dans le tableau IV.4.

b) Résultats expérimentaux

Nous avons obtenu pour des richesses allant de 0,25 à 1,5 les profils de concentration des réactifs, produits et principaux composés intermédiaires. Ces profils sont représentés sur les figures IV.11 à IV.14.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Les espèces intermédiaires majoritaires sont le monoxyde de carbone, le formaldéhyde, l'hydrogène, le méthane, l'éthylène, le propène, le méthanol, l'acétaldéhyde, le propanal, l'acroléine, l'acétone et l'oxirane.

On peut remarquer que les composés cycliques sont des produits minoritaires dont la concentration ne dépasse généralement pas les 40 ppm. Parmi ces espèces, les principaux représentants sont le cyclohexène, la cyclohexanone, la cyclohexèn-1-one et le benzène.

Sur la totalité des produits détectés et identifiés lors de cette étude, tous ont été répertoriés précédemment lors de l'étude de l'oxydation des 2 constituants de ce mélange. Ce mélange ne forme donc pas de composés spécifiques provenant d'une interaction entre les sous-mécanismes d'oxydation des 2 hydrocarbures initiaux en quantité notables.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{mélange}$ initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	richesse	Température (K)	référence
10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$5{,}88.10^{-2}$	$9{,}402.10^{-1}$	0,25	550-1050	Cette étude
10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$2{,}94.10^{-2}$	$9{,}696.10^{-1}$	0,50	550-1100	
10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$1{,}47.10^{-2}$	$9{,}843.10^{-1}$	1,00	550-1100	
10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$9{,}8.10^{-3}$	$9{,}892.10^{-1}$	1,50	550-1150	

Tableau IV.4: Oxydation du mélange décane/propylcyclohexane 60/40 (mole/mole) en réacteur auto-agité: conditions expérimentales

Le n-décane et le n-propylcyclohexane présentent, quelle que soit la richesse, des profils similaires et proches de ceux observés lors de l'oxydation de ces composés purs: une rapide consommation des 2 hydrocarbures entre 550 et 650 K qui ralentit ensuite jusqu'à environ 750 K avant de redémarrer définitivement.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

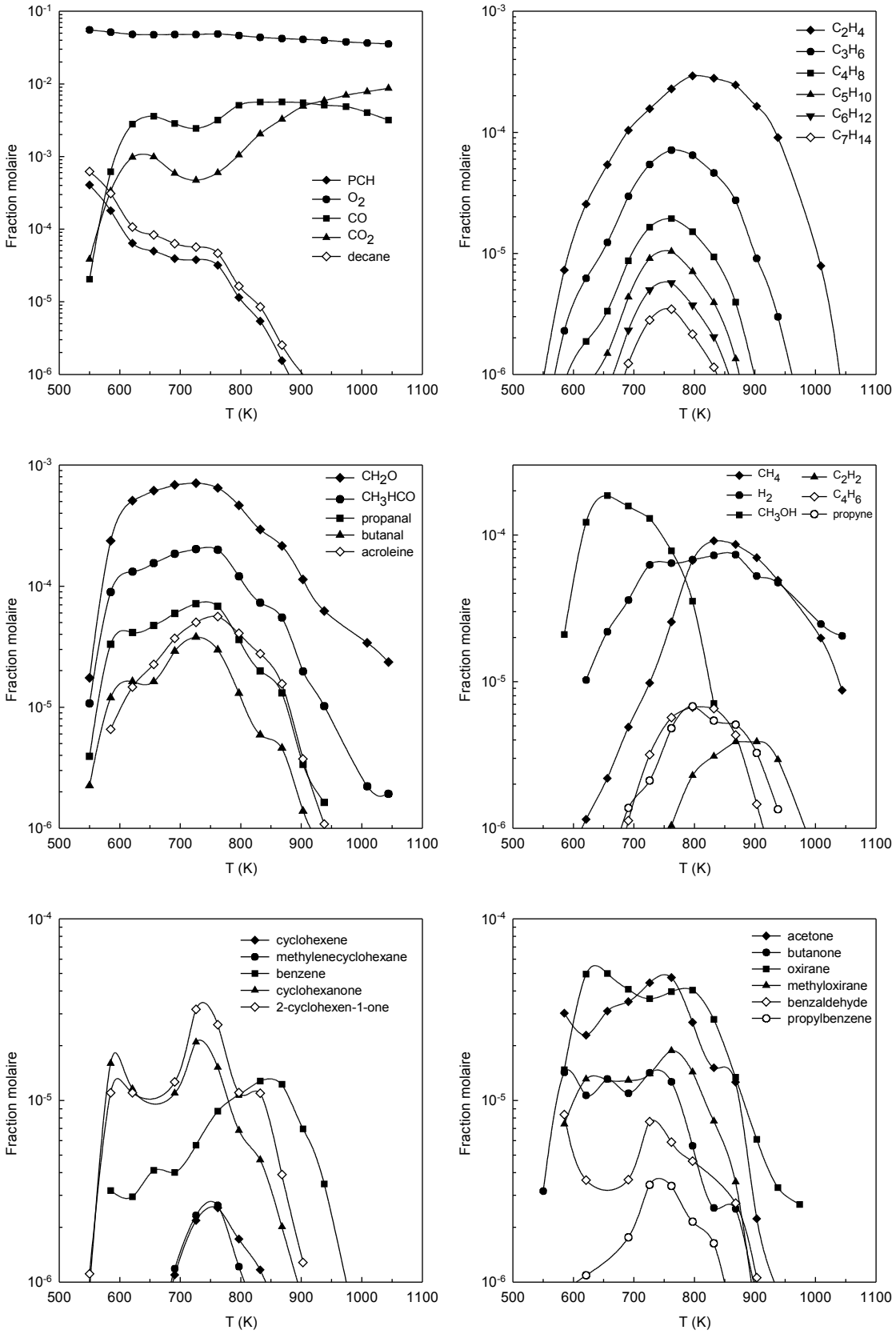


Figure IV.11: Oxydation du mélange n-décane/n-propylcyclohexane 60/40 (mole/mole) en réacteur auto-agité: P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

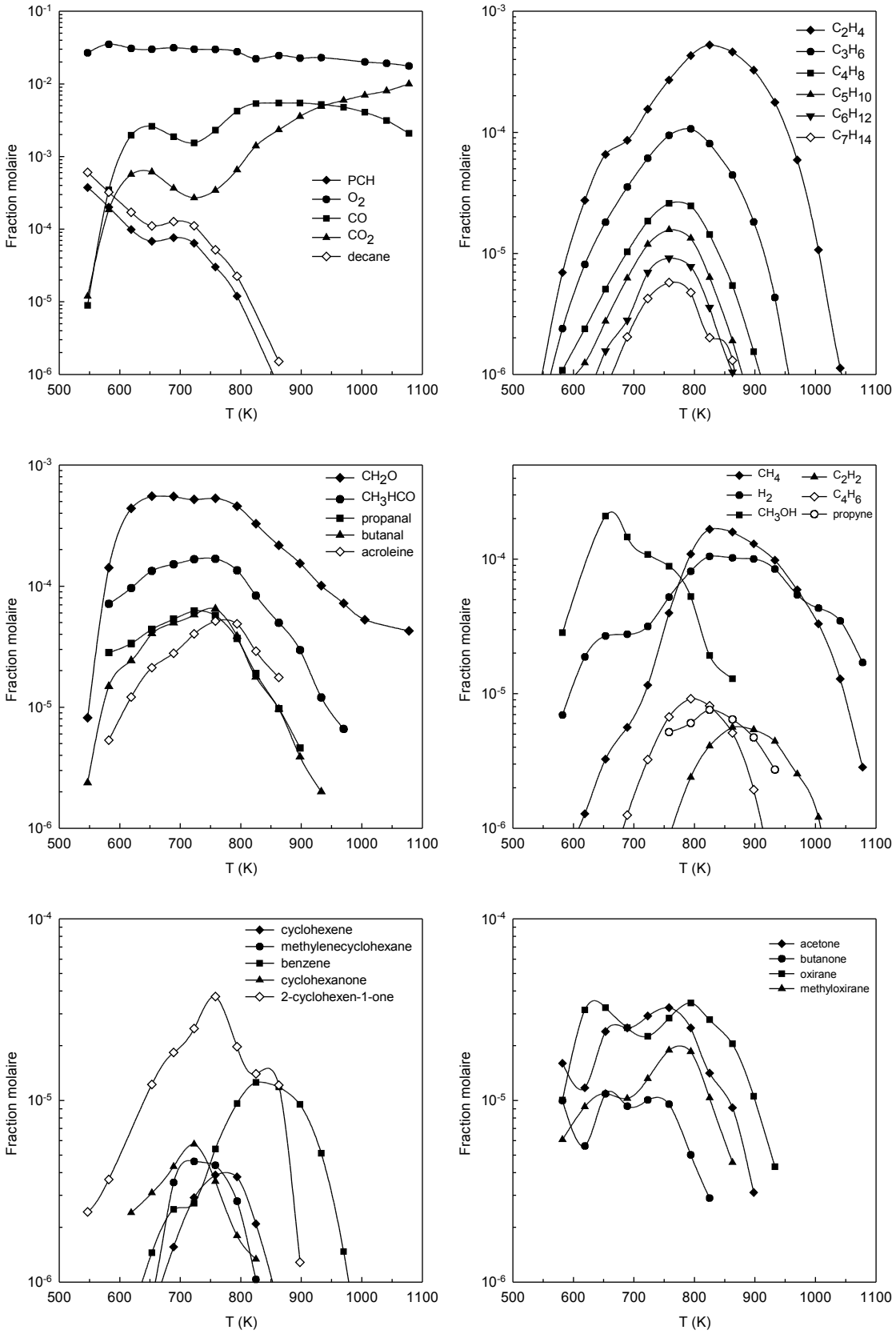


Figure IV.12: Oxydation du mélange n-décane/n-propylcyclohexane 60/40 (mole/mole) en réacteur auto-agité: P=10 bar ; φ=0,50 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

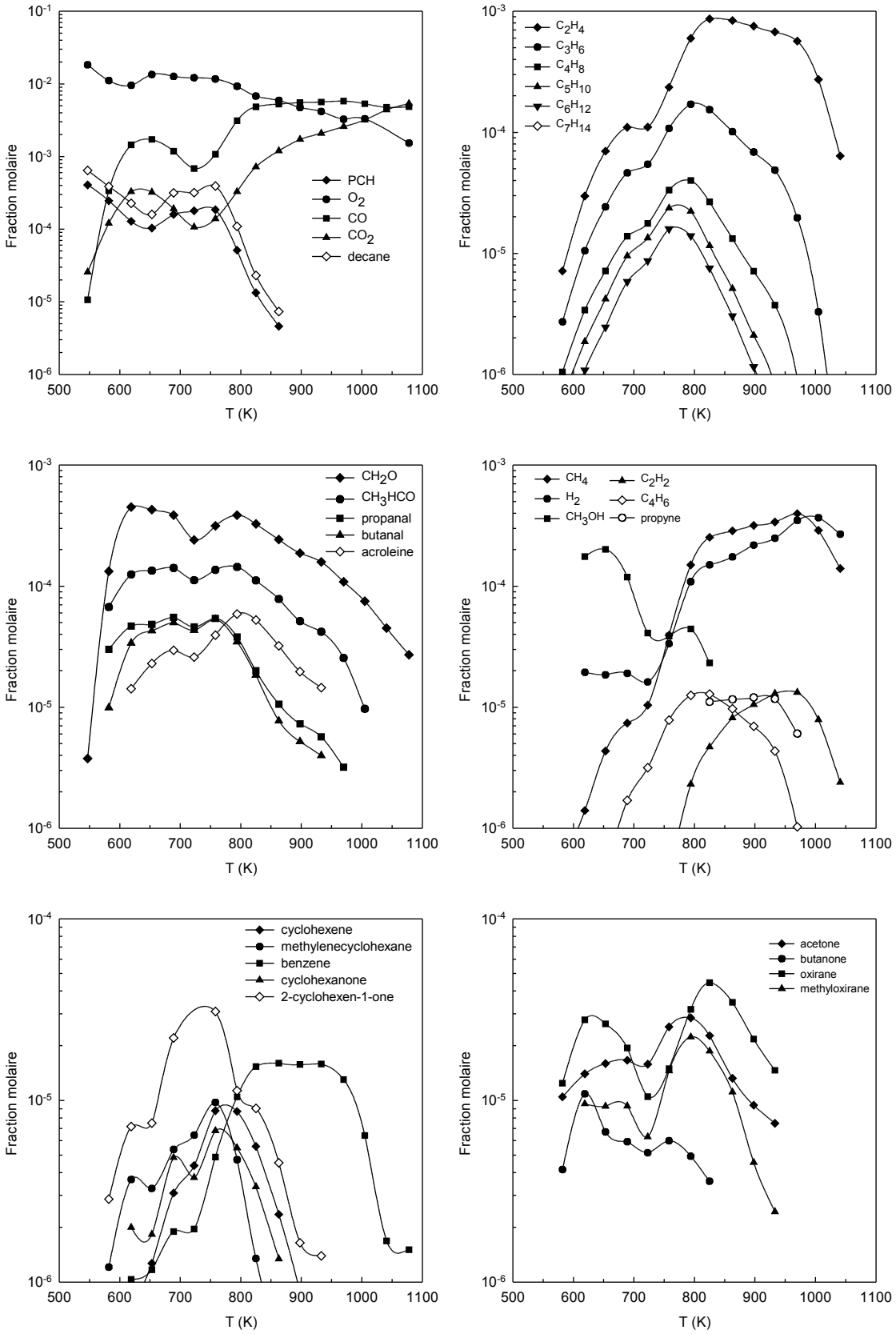


Figure IV.13: Oxydation du mélange n-décane/n-propylcyclohexane 60/40 (mole/mole) en réacteur auto-agité: P=10 bar ; φ=1,00 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

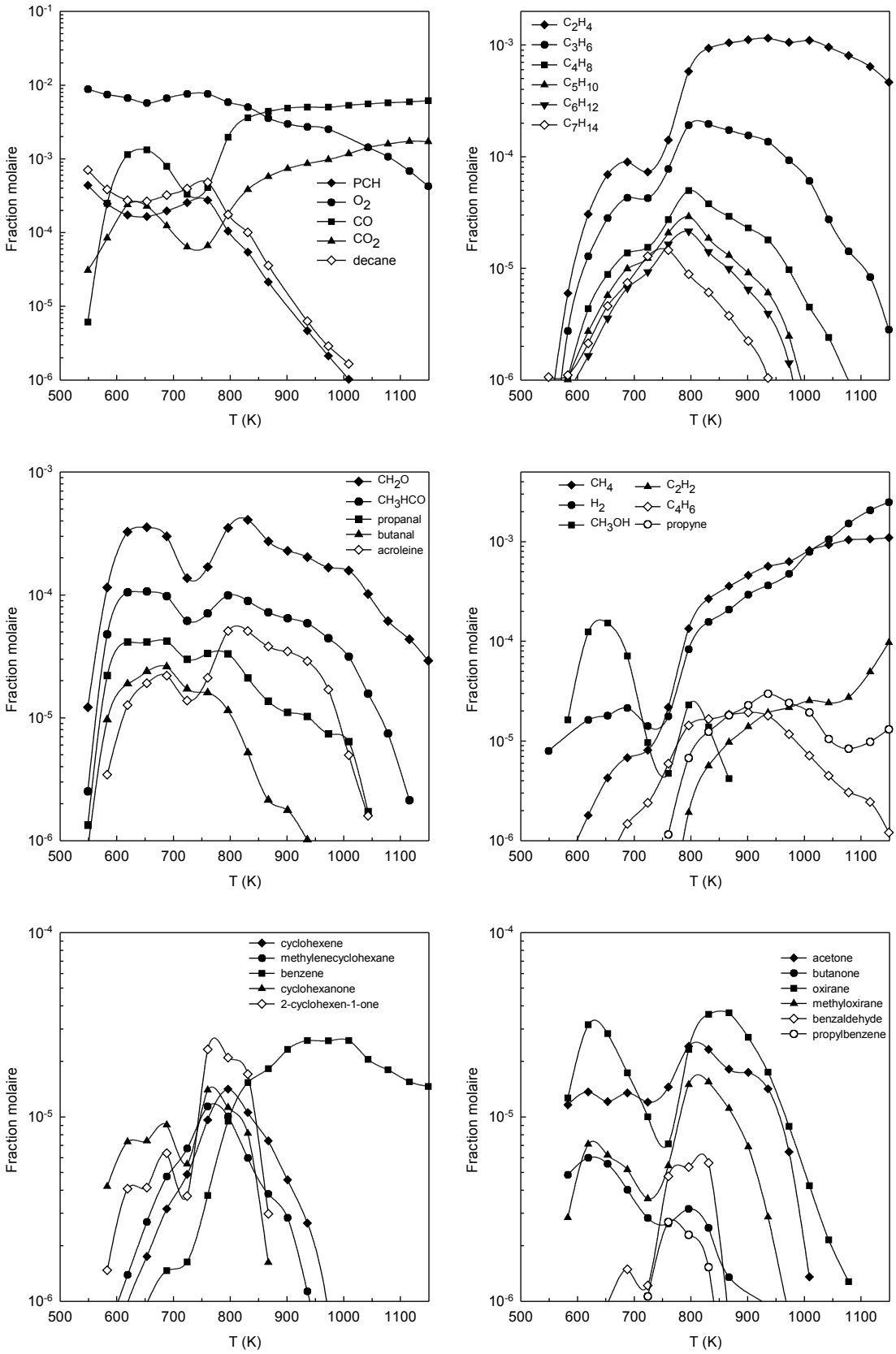


Figure IV.14: Oxydation du mélange n-décane/n-propylcyclohexane 60/40 (mole/mole) en réacteur auto-agité: P=10 bar ; φ=1,50 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

1.5 Oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène

a) conditions expérimentales

Dans ce mélange, la fraction molaire du n-décane est égale à 0,6 alors que celle du n-butylbenzène est de 0,4. De la même manière que pour le précédent mélange binaire, nous avons déterminé les 3 paramètres que sont la masse molaire, le facteur stœchiométrique et la masse volumique:

$$M(\text{mélange}) = 139{,}06\ g.mol^{-1}$$

$$Z = 14{,}7$$

$$\rho(\text{mélange, } 293\ K) \approx 0{,}774\ kg.L^{-1}$$

L'oxydation de ce mélange a été menée selon les conditions regroupées dans le tableau IV.5.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{mélange}$ initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	richesse	Température (K)	référence
10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$5{,}88.10^{-2}$	$9{,}402.10^{-1}$	0,25	550-1075	Cette étude
10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$2{,}94.10^{-2}$	$9{,}696.10^{-1}$	0,50	550-1075	
10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$1{,}47.10^{-2}$	$9{,}843.10^{-1}$	1,00	550-1050	
10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$9{,}8.10^{-3}$	$9{,}892.10^{-1}$	1,50	550-1110	

Tableau IV.5: Oxydation du mélange décane/butylbenzène 60/40 (mole/mole) en réacteur auto-agité: conditions expérimentales

b) Résultats expérimentaux

Les profils de concentration des principaux composés rencontrés lors de l'oxydation du mélange décane/butylbenzène sont représentés sur les figures IV.15 à IV.18.

Les espèces intermédiaires principales sont le monoxyde de carbone, l'éthylène, le formaldéhyde, l'acétaldéhyde, le méthanol, le méthane, l'hydrogène, le propène, le styrène, l'oxirane, le benzène, le but-1-ène, le propanal et le benzaldéhyde.

On peut remarquer sur ces profils que les espèces aromatiques majoritaires sont le styrène et le benzaldéhyde, ce qui est en accord avec les observations faites lors de l'oxydation du butylbenzène pur. Néanmoins elles sont présentes en plus faibles quantités et ne sont plus parmi les espèces les plus abondamment produites.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Comme pour le mélange binaire précédent, nous n'avons identifié aucune espèce supplémentaire en quantité notable par rapport à l'oxydation des 2 hydrocarbures constitutifs du mélange. Ceci tend également à montrer qu'il n'y aurait pas d'interaction forte entre les sous-mécanismes spécifiques des 2 hydrocarbures initiaux, et que les éventuelles interactions se feraient au travers des espèces et radicaux communs de faible taille.

On peut également remarquer qu'il existe une zone de coefficient négatif de température débutant à 650 K et se terminant entre 720 K (φ=0,25) et 760 K (φ=1,50). Ce coefficient négatif de température est particulièrement bien visible sur les profils de CO et CO_2 quelle que soit la richesse. L'amplitude de ce coefficient négatif de température est intimement lié à la quantité d'oxygène. Si l'on compare par exemple les profils d'éthylène aux différentes richesses, on devine un léger épaulement aux alentours de 700 K en milieu pauvre qui devient de plus en plus important avec l'augmentation de la richesse, jusqu'à engendrer une stagnation de la fraction molaire de ce composé sur la plage de température associée au coefficient négatif de température.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

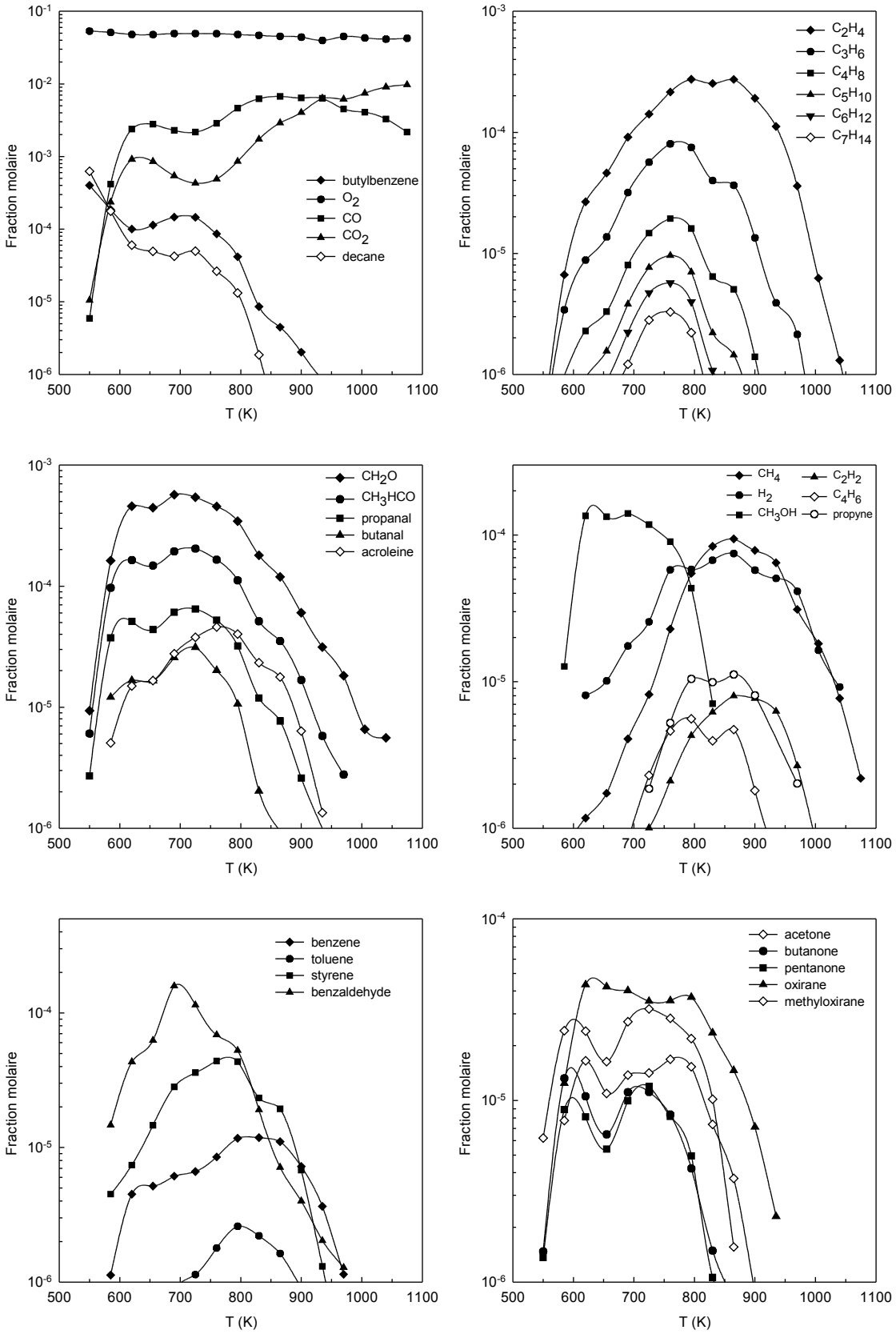


Figure IV.15: Oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène 60/40 (mole/mole) en réacteur auto-agité: P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

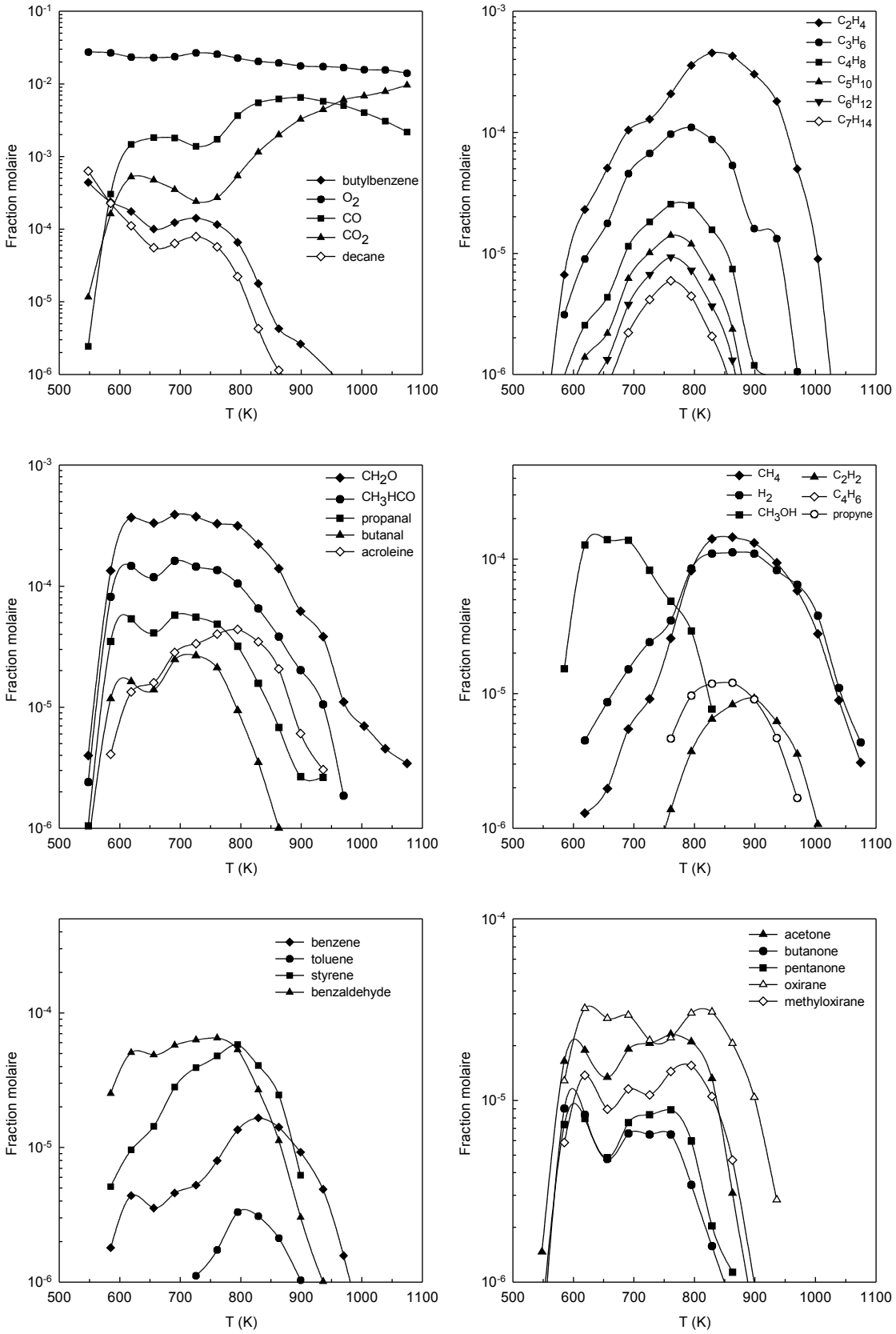


Figure IV.16: Oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène 60/40 (mole/mole) en réacteur auto-agité: P=10 bar ; φ=0,50 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

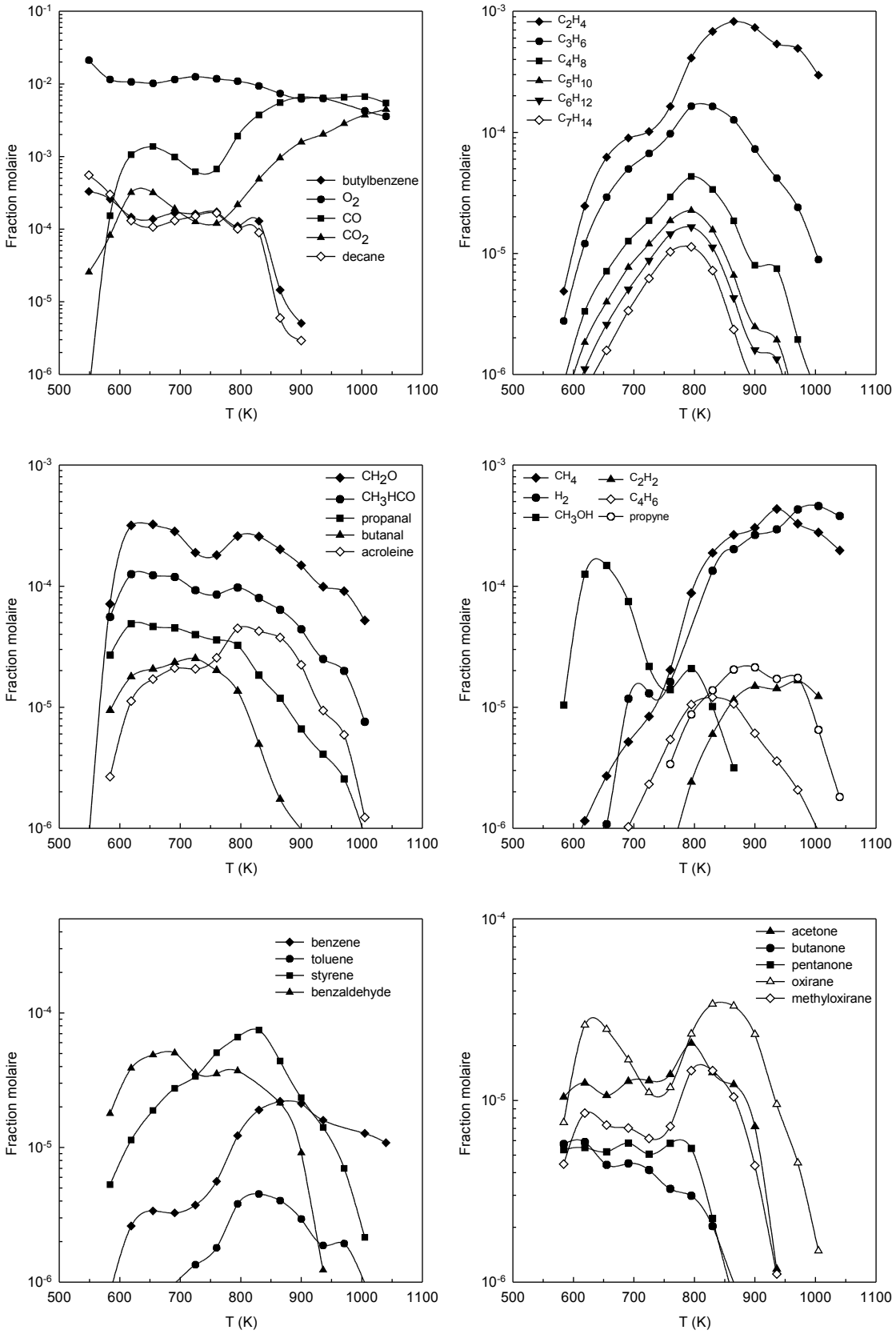


Figure IV.17: Oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène 60/40 (mole/mole) en réacteur auto-agité: P=10 bar ; φ=1,00 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

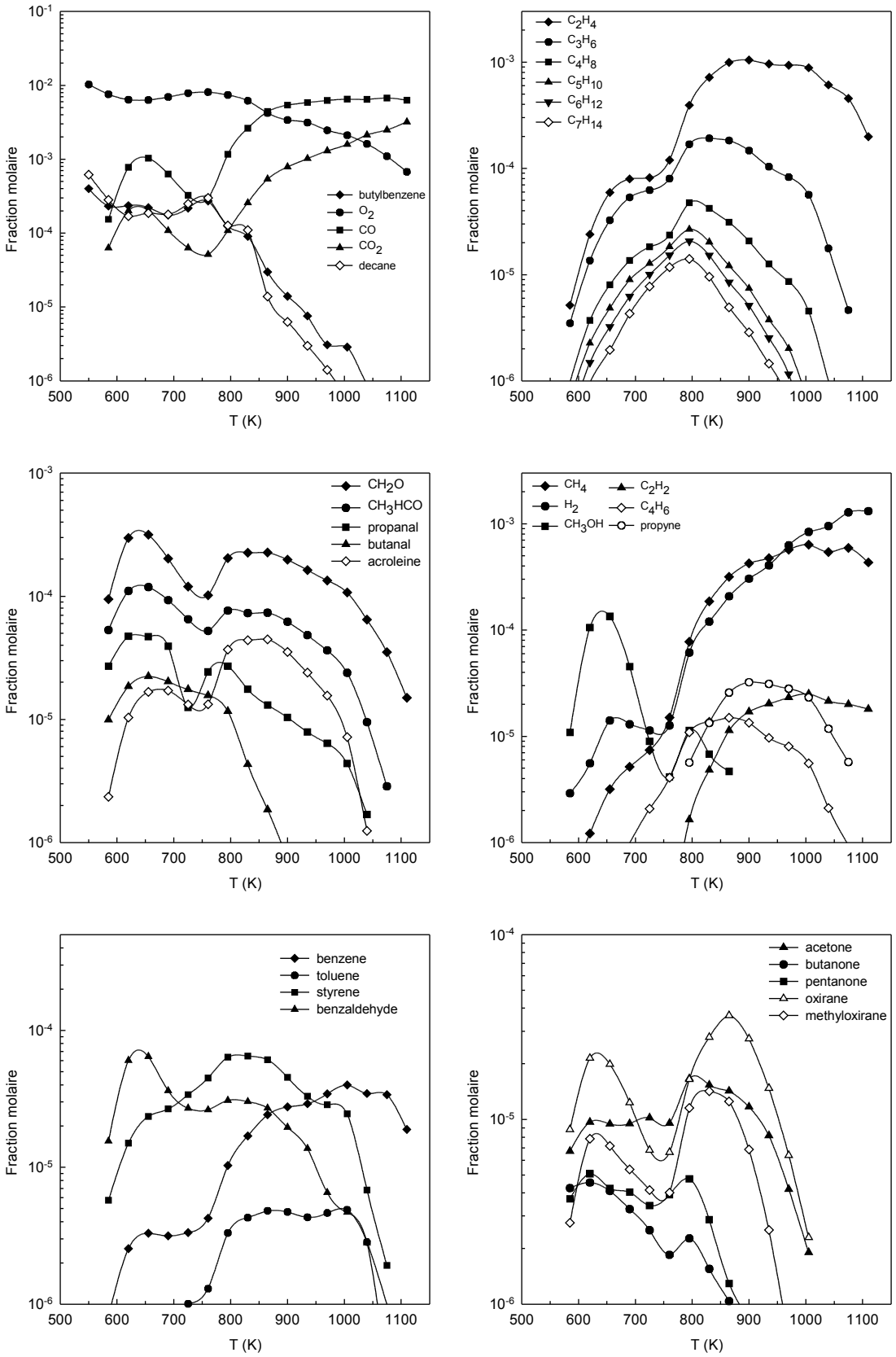


Figure IV.18: Oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène 60/40 (mole/mole) en réacteur auto-agité: P=10 bar ; φ=1,50 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

1.6 Oxydation du mélange n-décane/n-propylcyclohexane/n-butylbenzène

a) Conditions expérimentales

Pour représenter un gazole commercial, nous avons utilisé un mélange ternaire composé des 3 hydrocarbures étudiés plus haut. Ce mélange est constitué, en fraction molaire, de 40% de n-décane, 30% de n-propylcyclohexane et de 30% de n-butylbenzène. Les caractéristiques associées à ce mélange et utilisées pour la préparation des expériences sont les suivantes:

$$M(\text{mélange}) = 135{,}05\ g.mol^{-1}$$

$$Z = 14{,}3$$

$$\rho(\text{mélange, } 293\ K) \approx 0{,}778\ kg.L^{-1}$$

L'oxydation de ce mélange ternaire a été réalisée dans les conditions décrites dans le tableau IV.2.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{mélange}$ initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	richesse	Température (K)	référence
10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$5{,}72.10^{-2}$	$9{,}418.10^{-1}$	0,25	550-1110	Cette étude
10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$2{,}86.10^{-2}$	$9{,}704.10^{-1}$	0,50	550-1120	
10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$1{,}43.10^{-2}$	$9{,}847.10^{-1}$	1,00	550-1110	
10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$9{,}5.10^{-3}$	$9{,}895.10^{-1}$	1,50	550-1150	

Tableau IV.6: Oxydation du mélange décane / propylcyclohexane / butylbenzène 40/30/30 (mole/mole/mole) en réacteur auto-agité: conditions expérimentales

b) Résultats expérimentaux

Les résultats obtenus pour l'oxydation de ce mélange sont représentés sur les figures IV.19 à IV.21.

On peut remarquer que les espèces intermédiaires majoritaires sont les mêmes que celles observées lors des mélanges précédents. De plus comme lors des 2 mélanges binaires, nous n'avons observé aucune nouvelle espèce en quantité notable. Ceci nous indique que les sous-mécanismes spécifiques du butylbenzène et du propylcyclohexane n'interagissent pas fortement tout en partageant néanmoins le “pool” de petits radicaux (C_0-C_4).

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

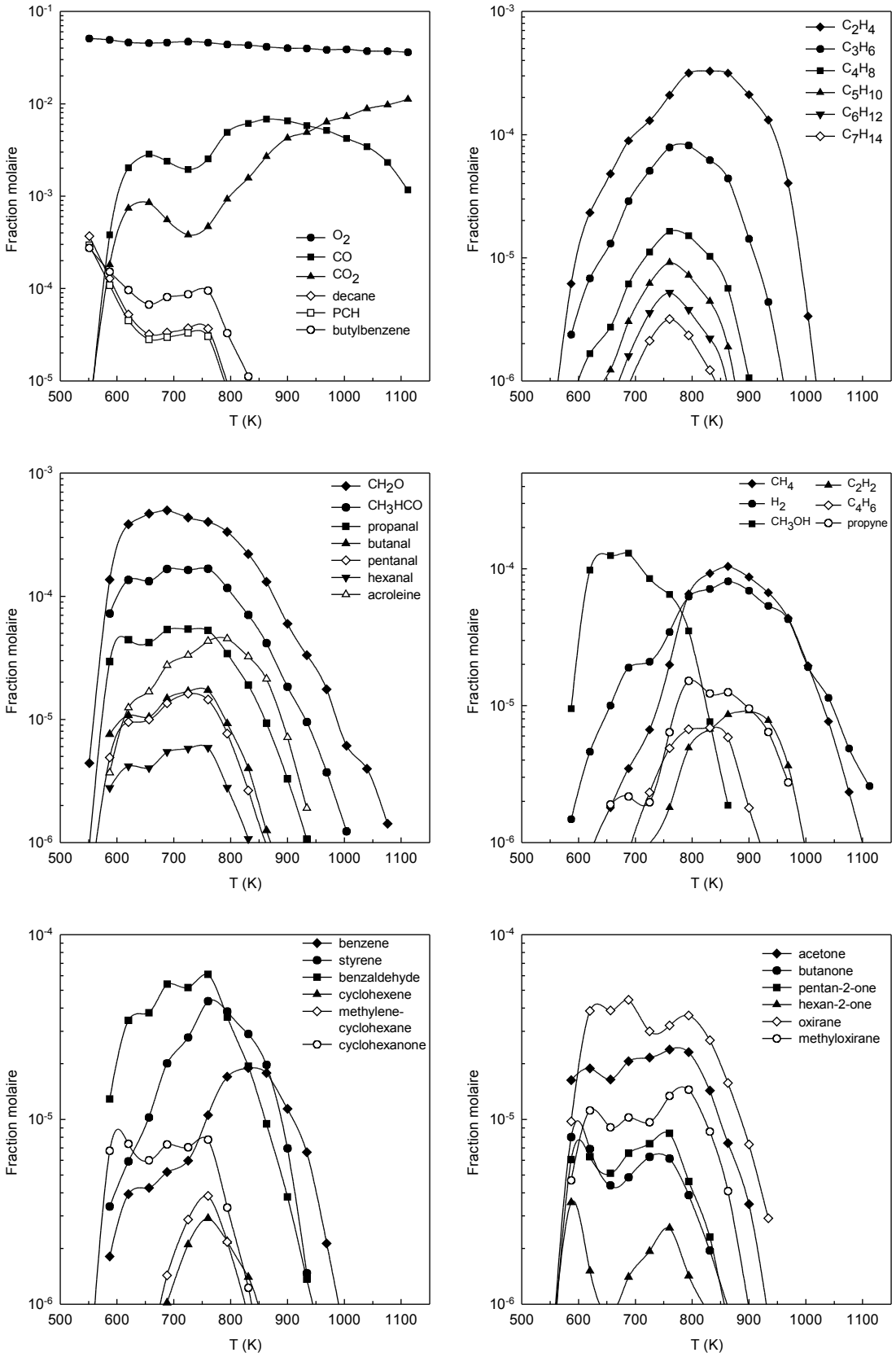


Figure IV.19: Oxydation du mélange n-décane / n-propylcyclohexane / n-butylbenzène 40/30/30 (mole/mole/mole) en réacteur auto-agité: P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

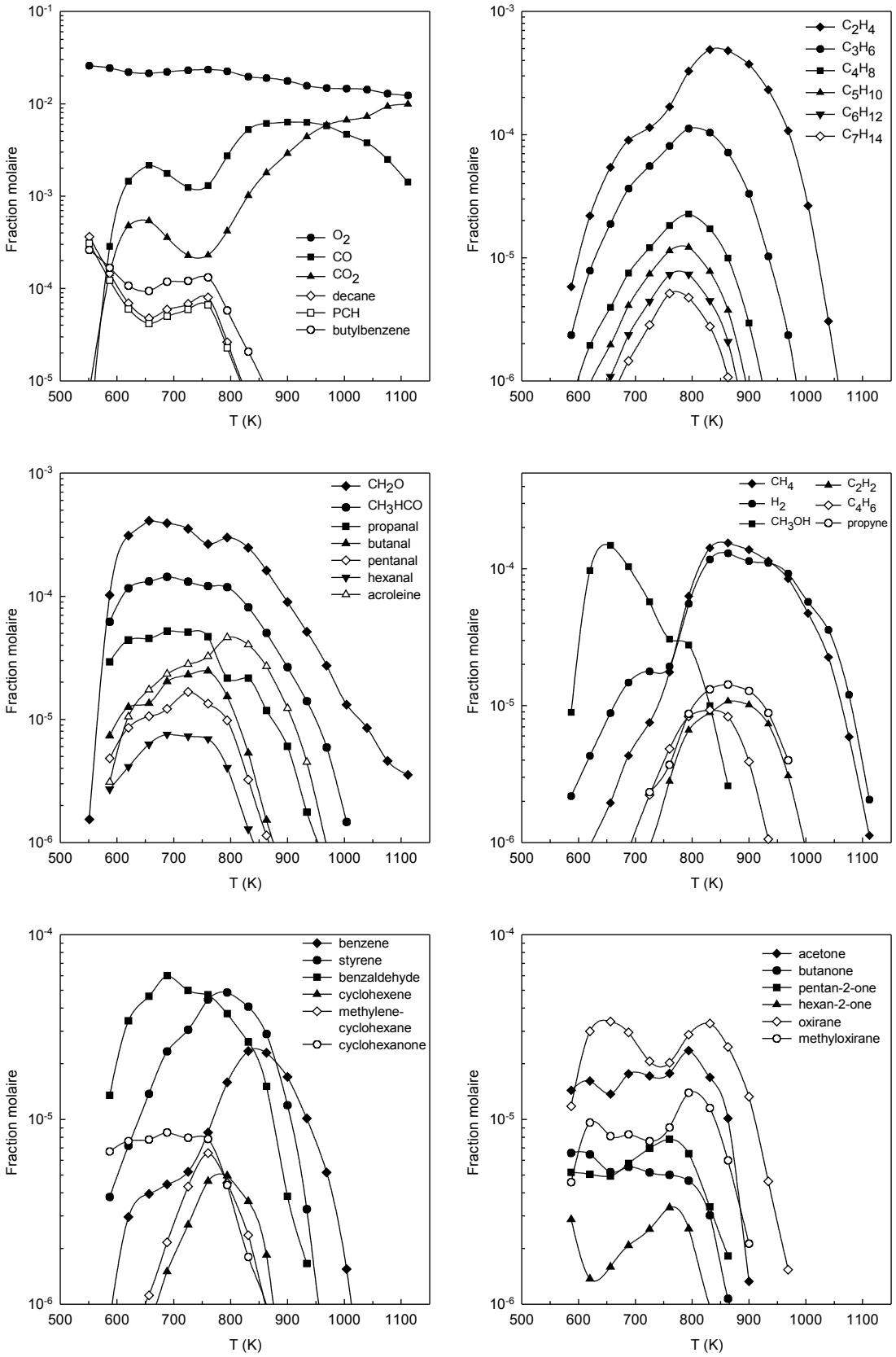


Figure IV.20: Oxydation du mélange n-décane / n-propylcyclohexane / n-butylbenzène 40/30/30 (mole/mole/mole) en réacteur auto-agité: P=10 bar ; φ=0,50 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

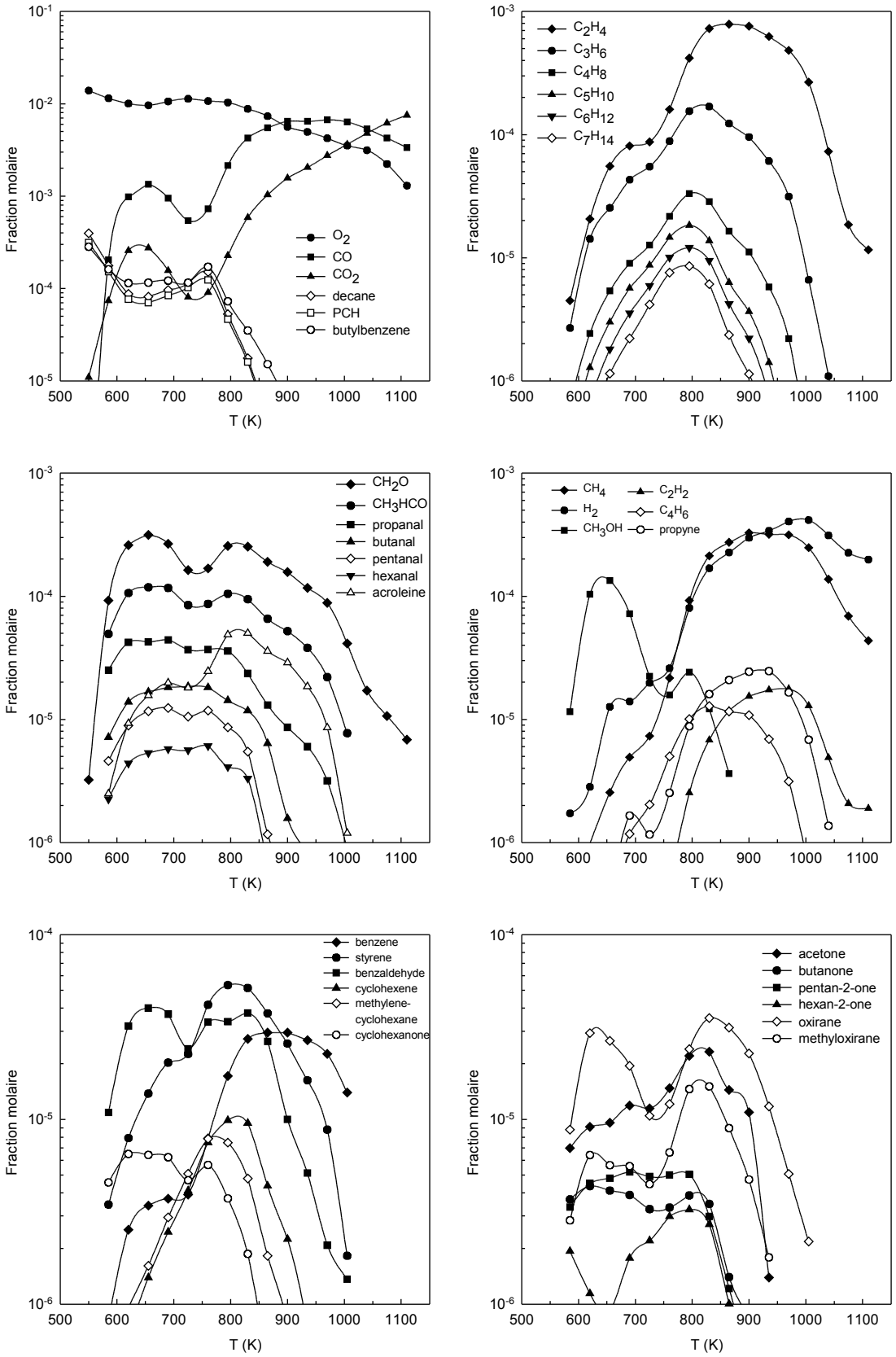


Figure IV.21: Oxydation du mélange n-décane / n-propylcyclohexane / n-butylbenzène 40/30/30 (mole/mole/mole) en réacteur auto-agité: P=10 bar ; φ=1,00 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

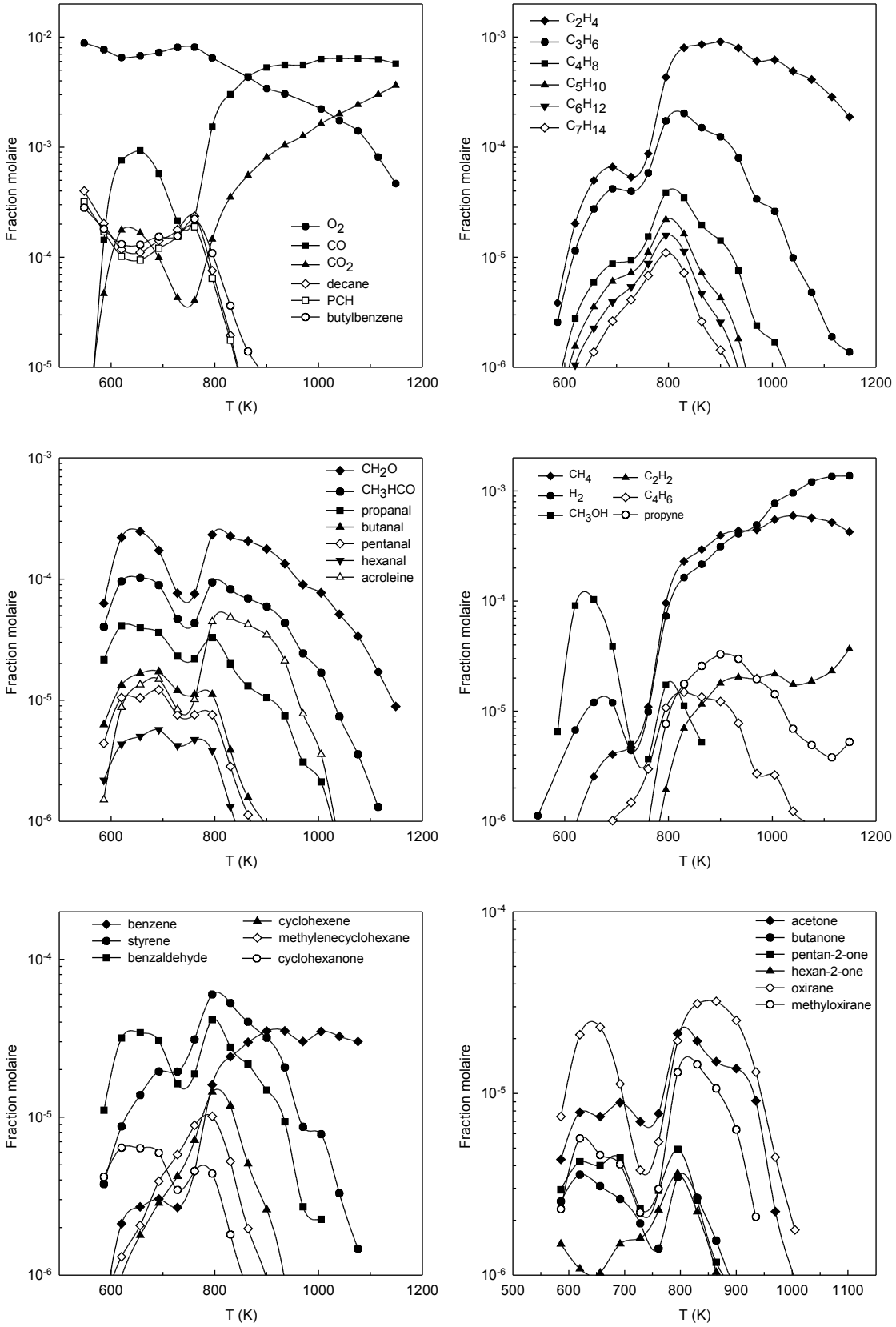


Figure IV.22: Oxydation du mélange n-décane / n-propylcyclohexane / n-butylbenzène 40/30/30 (mole/mole/mole) en réacteur auto-agité: P=10 bar ; φ=1,50 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Concernant la réactivité globale du système, elle diffère peu de celle observée pour les mélanges binaires. On remarque ainsi à basse température une consommation des réactifs associée à la formation d'intermédiaires oxygénés qui diminue (zone du coefficient négatif de température) ensuite entre 640 et 720-760 K (selon la richesse). Au-delà, on observe un processus d'oxydation de haute température qui consomme la totalité des réactifs initiaux.

2. Interactions au sein des mélanges

Dans cette partie, nous nous proposons d'étudier l'influence des différents hydrocarbures initiaux sur la vitesse d'oxydation de leur partenaire. Pour ce faire, nous allons dans un premier temps déterminer la vitesse d'oxydation globale de chaque réactif, et ensuite nous comparerons ces vitesses selon la composition du mélange initial.

2.1 Détermination de la vitesse de réaction d'un composé

Les expériences ont été menées dans un réacteur ouvert parfaitement agité. Dans un réacteur idéal, l'équation de bilan matière s'écrit pour une espèce i quelconque:

$$\begin{bmatrix}\text{débit}\\ \text{de i}\\ \text{entrant}\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}\text{débit de}\\ \text{production}\\ \text{de i}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\text{débit}\\ \text{de i}\\ \text{sortant}\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}\text{débit}\\ \text{d'accumulation}\\ \text{de i}\end{bmatrix} \qquad \text{Équation IV.3}$$

soit

$$F_{E,i}+\iiint R_i\,dV=F_{S,i}+\frac{dn_i}{dt} \qquad \text{Équation IV.4}$$

où

F_i	débit molaire de l'espèce i
R_i	débit de production chimique (si négatif: consommation, si positif: production)
dn_i/dt	débit d'accumulation de l'espèce i dans le réacteur
E, S	entrée et sortie du réacteur respectivement

Dans un réacteur ouvert parfaitement agité, le débit d'accumulation est nul (car on travaille en régime permanent), la pression P, la température T et la vitesse de production de l'espèce i R_i sont constantes et uniformes dans tout le volume. L'équation IV.4 se simplifie donc en l'équation IV.3.

$$R_i=\frac{F_{S,i}-F_{E,i}}{V_R} \qquad \text{Équation IV.5}$$

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Si l'on introduit les fractions molaires X de telle manière que $F_i=X_i.F_{total}$, et que l'on suppose que le mélange gazeux est parfait (P.Q = F.R.T), on obtient:

$$R_i = \frac{P}{RT}\left(\frac{X_{S,i}Q_S - X_{E,i}Q_E}{V_R}\right) \qquad \text{Équation IV.6}$$

Les différentes expériences ont été menées avec un fort taux de dilution, on peut donc considérer le débit volumique total comme constant ($Q = Q_E \approx Q_S$). Le rapport Q_E/V_R apparaît alors et n'est autre que l'inverse du temps de passage τ défini au chapitre précédent. L'expression du débit chimique de production de l'espèce i s'écrit donc:

$$R_i = \frac{P}{RT}\left(\frac{X_{S,i} - X_{E,i}}{\tau}\right) \qquad \text{Équation IV.7}$$

avec

R_i	débit de production chimique (si négatif: consommation, si positif: production)
P	la pression
T	la température
τ	le temps de passage
$X_{E,i}$ et $X_{S,i}$	les fractions molaires de l'espèce i en entrée et en sortie de réacteur respectivement
R	la constante des gaz parfaits

2.2 Comparaison des vitesses d'oxydation - Influence des partenaires.

Dans les lignes qui suivent l'influence de la concentration initiale des réactifs hydrocarbonés a été écartée en divisant la vitesse expérimentale par leur fraction molaire initiale.

a) Influence de la richesse

Nous avons déterminé les vitesses d'oxydation du butylbenzène et du n-décane aux différentes richesses pour lesquels nous avons obtenu des résultats.

On s'aperçoit que pour ces deux composés, la vitesse globale de consommation du réactif initial augmente lorsque la richesse diminue. Dans le cas du n-décane (figure IV.20), cela est particulièrement visible aux basses températures. En effet la vitesse d'oxydation maximale à basse température est de l'ordre de 20% plus faible en milieu stœchiométrique qu'en milieu pauvre, et cet écart monte jusqu'à 60% à la fin de la zone du coefficient négatif de température. A l'inverse, aux

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

plus hautes températures, la vitesse d'oxydation se révèle être indépendante de la richesse. On peut également noter que la vitesse maximale à basse température est atteinte d'autant plus tôt que la concentration en oxygène est élevée.

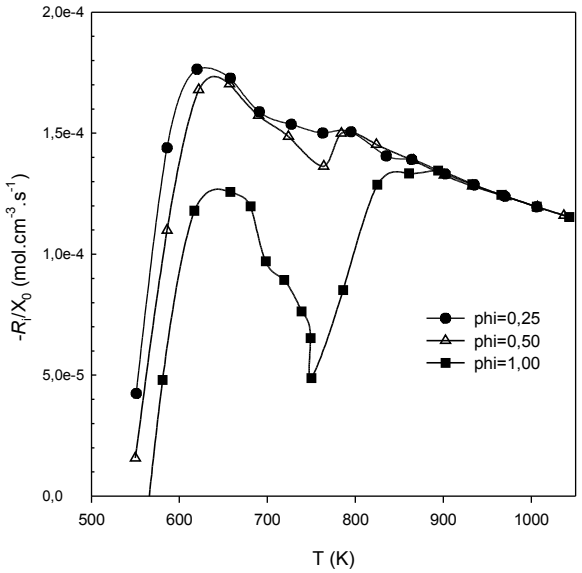


Figure IV.23: Évolution en fonction de la température de la vitesse de consommation du décane en réacteur auto-agité (P=10 bar; τ=1s)

Pour le n-butylbenzène (figure IV.9), l'influence de la richesse est plus faible, et ne peut être visualisée nettement qu'aux alentours de 750 K, zone où redémarre la consommation de l'hydrocarbure à haute température. On s'aperçoit dans cette zone que la réaction démarre à des températures d'autant plus faibles que la concentration en oxygène est élevée. Mais cette vitesse de réaction est rapidement plafonnée vers une valeur moyenne qui semble indépendante de la richesse.

Pour ces 2 hydrocarbures, si l'on considère un mécanisme global de type $C_xH_y+Z\ O_2 = xCO_2+y/2\ H_2O$ auquel on associe une loi de vitesse globale $r = k(T)[C_xH_y]^{\alpha}[O_2]^{\beta}$, les remarques précédentes indiquent que le coefficient sur l'oxygène β est positif, comme lors de tous les processus d'oxydation répertoriés.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

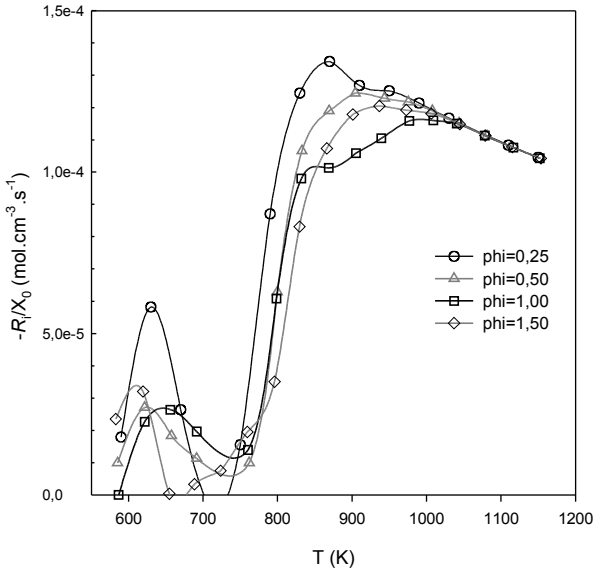


Figure IV.24: Évolution en fonction de la température de la vitesse de consommation du butylbenzène en réacteur auto-agité (P=10 bar; τ=1s)

b) Influence des partenaires d'oxydation

Nous avons étudié divers mélanges à base de décane. Les résultats obtenus concernant le profils des réactifs initiaux nous permettent de visualiser l'influence que peut avoir la composition initiale du mélange.

✗ décane

Si l'on s'intéresse d'abord au n-décane (figure IV.8), on peut voir que les influences se limitent, comme pour l'oxygène, aux plus basse températures, et notamment à la zone du coefficient négatif de température. L'influence du butylbenzène et du propylcyclohexane en milieu pauvre apparaît faible, même si la présence de ce dernier semble ralentir la consommation de l'alcane. Par contre en milieu stœchiométrique, cette incidence est plus marquée. On peut en effet constater que la présence du naphtène a un léger effet inhibiteur (qui est cependant à relativiser vis-à-vis des incertitudes expérimentales) alors que l'ajout du butylbenzène a un caractère promoteur assez marqué sur la conversion du décane. Cet effet du butylbenzène compense dans le mélange ternaire l'éventuel effet inhibiteur du propylcyclohexane, à tel point que celui-ci semble ne pas avoir d'influence dans ce mélange.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

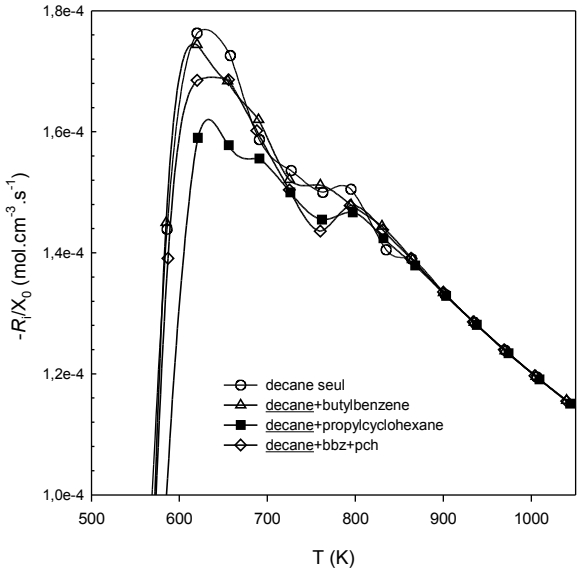


Figure IV.25: Évolution en fonction de la température de la vitesse de consommation du n-décane à φ=0,25 en réacteur auto-agité dans les différents mélanges étudiés (P=10 bar; τ=1s)

✗ Propylcyclohexane

L'oxydation de basse température du propylcyclohexane n'a été étudiée qu'à une richesse de 0,25. L'effet du décane et du butylbenzène ne peut donc être visualisée que dans ces conditions, et on s'aperçoit alors que cet effet n'est clairement marqué qu'entre 650 et 800 K, soit dans la zone du coefficient négatif de température. Le n-décane et le n-butylbenzène semblent avoir tous deux un effet promoteur sur l'oxydation du propylcyclohexane. On note que la vitesse de consommation du propylcyclohexane dans le mélange binaire décane/propylcyclohexane et dans le mélange ternaire est sensiblement identique à celle déterminée lorsque le cyclane est seul. Aux richesses plus élevées, la substitution d'une partie du décane par du butylbenzène favorise l'oxydation du propylcyclohexane, tendant à montrer un caractère promoteur plus prononcé du butylbenzène par rapport au décane.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

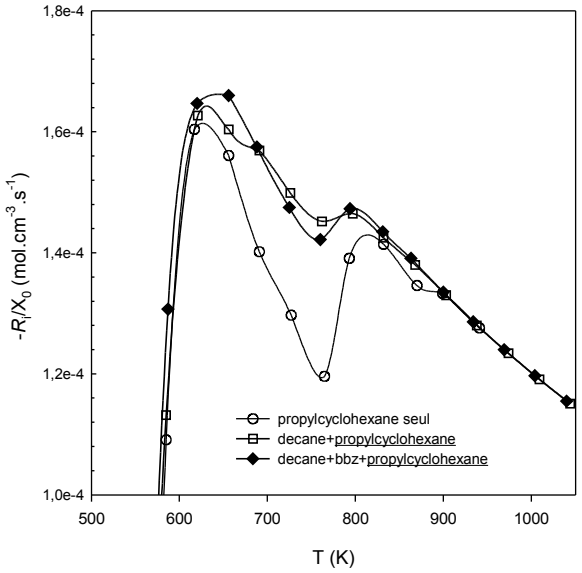


Figure IV.26: Évolution en fonction de la température de la vitesse de consommation du propylcyclohexane à φ=0,25 en réacteur auto-agité dans les différents mélanges étudiés (P=10 bar; τ=1s)

Dans nos conditions l'effet promoteur du décane peut s'expliquer par l'augmentation de la quantité d'oxygène introduite (nous avons travaillé à richesse constante) provoquée par la substitution d'une partie du propylcyclohexane. On a vu précédemment que l'augmentation de la concentration en oxygène favorisait la conversion de l'hydrocarbure initial. Cependant cette explication ne peut expliquer totalement ces observations, et n'est pas valable dans le cas de la substitution par le butylbenzène.

✗ Butylbenzène

L'influence du décane et du propylcyclohexane sur l'oxydation du butylbenzène est fortement marquée à basse température. Alors que lorsqu'il est seul, la consommation du butylbenzène à basse température est pratiquement nulle, en mélange, sa vitesse d'oxydation est comparable à celle des 2 autres hydrocarbures et une zone de coefficient négatif de température bien marquée apparaît quelle que soit la richesse.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

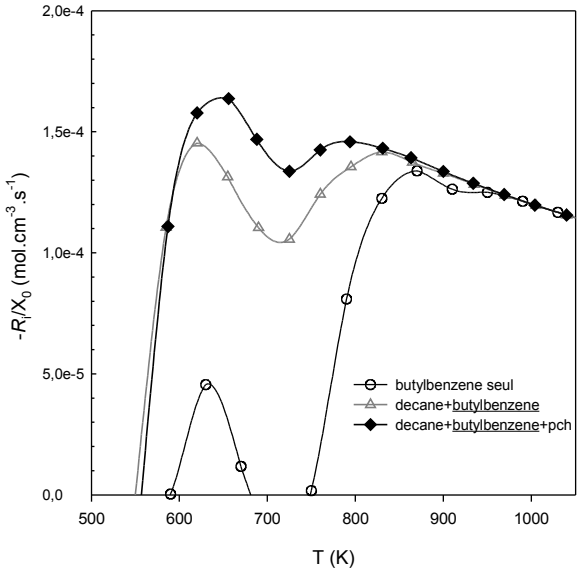


Figure IV.27: Évolution en fonction de la température de la vitesse de consommation du butylbenzène à φ=0,25 en réacteur auto-agité dans les différents mélanges étudiés (P=10 bar; τ=1s)

Cette spectaculaire augmentation de la réactivité peut s'expliquer par le fait que le décane et le propylcyclohexane vont approvisionner continuellement le "pool" de radicaux communs, radicaux qui vont également réagir avec le butylbenzène et entraîner sa consommation. En l'absence de ces deux réactifs, le réservoir est difficilement alimenté par le butylbenzène étant donné la formation de radicaux benzyliques stabilisés et la courte chaîne latérale limitant les isomérisations des radicaux RO_2.

3. Formation des polluants

Nous avons vu lors du premier chapitre que le moteur HCCI fonctionnait à des températures plus faibles que les moteurs thermiques conventionnels (température typiquement inférieure à 1000 K). Si cela présente l'avantage de limiter la formation des oxydes d'azote et des particules, cela entraîne l'émission de nombreux hydrocarbures imbrûlés.

Dans cette partie nous nous proposons d'observer l'influence de la composition du carburant sur les quantités d'hydrocarbures imbrûlés rejetées. Les polluants auxquels nous nous intéresserons sont le benzène, le buta-1,3-diène, le formaldéhyde, l'acétaldéhyde (ces 4 composés sont réglementés aux Etats-Unis, et regroupés avec les HAP sous le nom de Toxic Air Pollutants TAP) et le méthane (composé ayant une forte influence sur l'effet de serre). Par ailleurs, Piperel *et al* [10] ont déterminé la composition des gaz d'échappement en sortie d'un moteur HCCI fonctionnant au gazole (EN590) et le long du circuit de recirculation des gaz brûlés. Ils ont observé que ces 5

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

composés étaient présents en quantité non négligeables. De plus nous ne nous intéresserons qu'aux résultats obtenus en milieu pauvre (richesse 0,25) ce qui correspond à la plage de fonctionnement du moteur HCCI.

3.1 Benzène

Sur la figure IV.12 sont représentés les profils de benzène obtenus lors des expériences réalisés sur les différents carburants étudiés. On s'aperçoit immédiatement que le butylbenzène est le composé engendrant les plus fortes quantités de benzène devant le propylcyclohexane et loin devant le décane. Cette observation se comprend par la présence dans le réactif initial d'un noyau aromatique. Quant aux teneurs observées lors de l'oxydation du naphtène, elles s'expliquent par la déshydrogénation successive du cycle carboné de la molécule initiale. On peut également voir que le butylbenzène forme tardivement du benzène par rapport au propylcyclohexane, ce qui peut se comprendre par la réactivité plus faible de l'aromatique comme on a pu le constater précédemment.

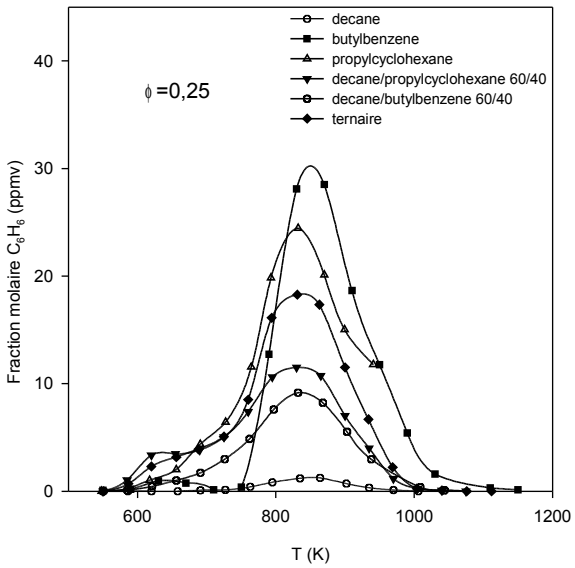


Figure IV.28: Évolution en fonction de la température de la fraction molaire de benzène lors de l'oxydation de divers carburants en réacteur auto-agité: P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

Dans le cas des mélanges, on remarque que la température à laquelle la concentration en benzène est maximale est sensiblement la même dans tous les cas et proche de celle observée pour le propylcyclohexane, soit 830 K. Il est également intéressant de remarquer que la quantité maximale de benzène produite semble suivre une loi du type $X^{max}_{C_6H_6,mix} = \sum_i X_{i,0} X^{max}_{C_6H_6,i}$ dans

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

laquelle $X_{i,0}$ est la fraction molaire initiale de l'hydrocarbure i dans le mélange et $X_{C_6H_6,i}^{max}$ la quantité maximale de benzène produite lors de l'oxydation de 1000 ppm du composé i seul.

3.2 Buta-1,3-diène

L'évolution de la quantité de buta-1,3-diène produite en fonction de la température est représentée sur la figure IV.13. On peut voir que dans ces conditions les quantités formées sont faibles (7 ppm maximum). Ce composé n'est pratiquement pas formé par le butylbenzène lorsqu'il est seul, alors que le n-décane et le n-propylcyclohexane en produisent assez facilement. On peut par ailleurs noter que le décane forme le butadiène légèrement plus tôt que tous les autres carburants. Dans les mélanges, la quantité maximale produite ne semble pas suivre une loi comme celle rencontrée pour le benzène mais paraît être indépendante de la composition initiale. On peut cependant noter qu'il semblerait que la présence de décane et/ou propylcyclohexane permette au butylbenzène de produire de plus grandes quantités de butadiène que lorsqu'il est oxydé seul.

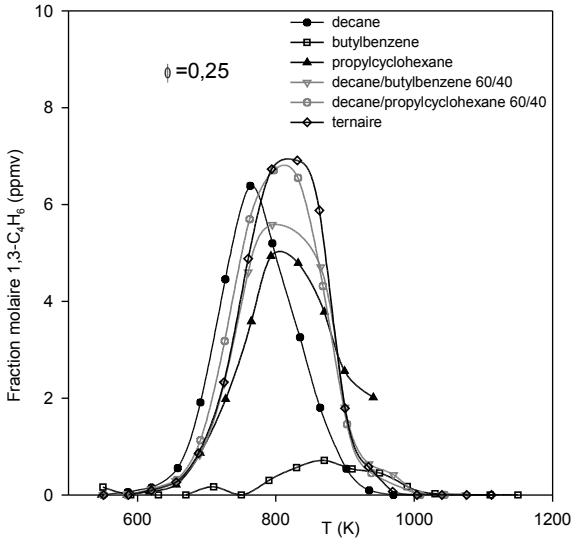


Figure IV.29: Évolution en fonction de la température de la fraction molaire de buta-1,3-diène lors de l'oxydation de divers carburants en réacteur auto-agité: P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

3.3 Formaldéhyde

Le formaldéhyde est un intermédiaire clé de l'oxydation des hydrocarbures. On peut voir sur la figure IV.16 qu'il est formé très tôt lors par les différents mélanges hydrocarbonés et en très grandes quantités. Il est cependant produit en majorité par le n-décane puis par le propylcyclohexane. Le butylbenzène en produit relativement peu, et le profil dans ce cas précis

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

présente une zone de coefficient négatif de température. L'ajout de butylbenzène au décane comme partenaire d'oxydation a pour conséquence de fortement diminuer la quantité de formaldéhyde formée par le décane et de faire apparaître une zone de CNT et de ralentir énormément la consommation de ce produit. Par contre l'ajout de propylcyclohexane a un effet inverse puisqu'il favorise la formation de cet aldéhyde.

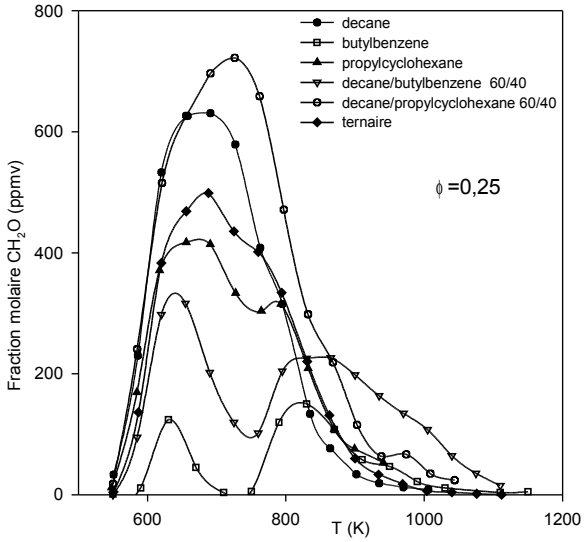


Figure IV.30: Évolution en fonction de la température de la fraction molaire de formaldéhyde lors de l'oxydation de divers carburants en réacteur auto-agité: P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

3.4 Acétaldéhyde

L'acétaldéhyde est comme le formaldéhyde formé très tôt durant l'oxydation des hydrocarbures. Les profils (figure IV.17) se présentent, à l'exception de celui du décane/propylcyclohexane, sous la forme d'un double pic. La faculté des 3 composés étudiés à produire cet aldéhyde est similaire à celle vue pour le formaldéhyde, à savoir que le décane en forme plus que le propylcyclohexane, qui en produit lui-même plus que le butylbenzène. On peut également noter que le butylbenzène est le seul à former tardivement de l'acétaldéhyde à haute température (800 K contre 700 K pour les 2 autres composés), mais cela n'est plus le cas en présence de décane.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

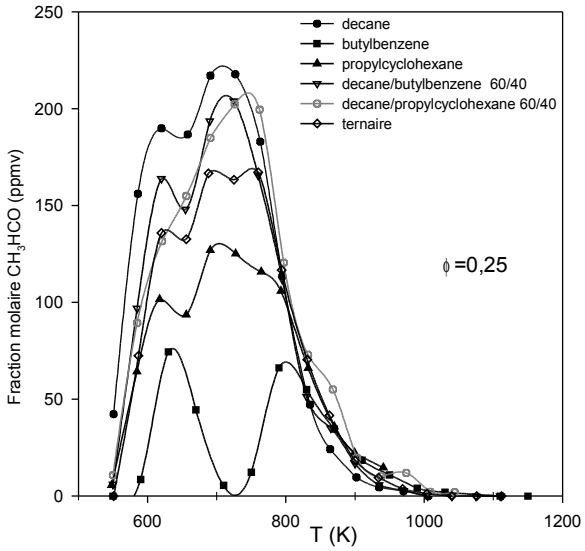


Figure IV.31: Évolution en fonction de la température de la fraction molaire d'acétaldéhyde lors de l'oxydation de divers carburants en réacteur auto-agité: P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

3.5 *Méthane*

Le méthane est un produit intermédiaire provenant des nombreuses réactions de métathèse du radical méthyle lors de l'oxydation des hydrocarbures lourds. Si l'on s'intéresse dans un premier temps aux résultats relatifs aux 3 hydrocarbures purs, les quantités détectées les plus importantes le sont lors de l'oxydation du décane et les plus faibles lors de celle du butylbenzène. On remarque également que le décane est le composé formant le plus rapidement du méthane et le butylbenzène celui en produisant le plus tardivement. Ces observations sont également applicable aux températures correspondant au pic de concentration en méthane. Par contre, la concentration maximale de méthane ne semble pas suivre une règle bien précise. Si le butylbenzène isolé semble ne pas produire énormément de méthane, les effets conjugués du décane et du propylcyclohexane augmentent le rendement du butylbenzène en méthane, à tel point que le mélange ternaire produit presque autant de méthane que le décane seul, et que les 2 mélanges binaires sont aussi productifs l'un que l'autre.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

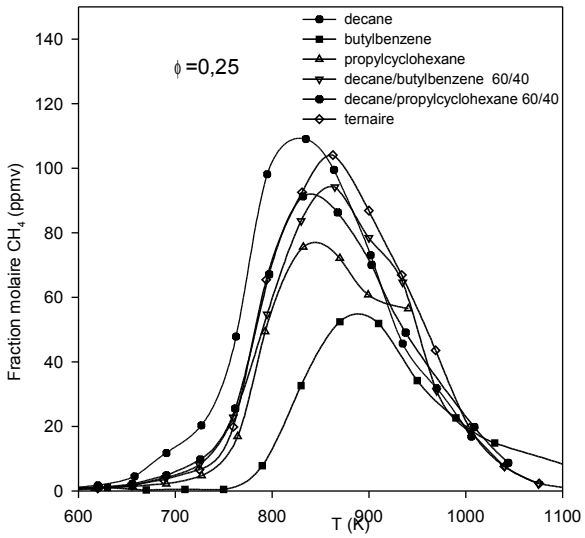


Figure IV.32: Évolution en fonction de la température de la fraction molaire de méthane lors de l'oxydation de divers carburants en réacteur auto-agité: P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}=0,1%

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

© 2009 Tous droits réservés.

http://doc.univ-lille1.fr

CONCLUSION

Nous avons étudié l'oxydation en réacteur auto-agité du n-décane, du n-propylcyclohexane et du n-butylbenzène. Les expériences ont été réalisées à haute pression (10 atm) et dans un large domaine de température (550-1150 K). Les profils de concentration des réactifs, produits et principaux intermédiaires stables ont été déterminés. Par la suite les mêmes résultats ont été obtenus lors des études menées avec les mélanges n-décane/n-propylcyclohexane 60/40 (mole/mole), n-décane/n-butylbenzène 60/40 (mole/mole) et n-décane/n-propylcyclohexane/n-butylbenzène 40/30/30 (mole/mole/mole).

La détermination des vitesses globales d'oxydation pour chacun des constituants initiaux des mélanges a permis d'observer l'effet réciproque de chacun de ces hydrocarbures. Ainsi le n-décane présente un fort effet accélérateur sur l'oxydation du n-butylbenzène dans la plage de température 550-750 K. Cet effet se caractérise par la présence pour l'hydrocarbure aromatique d'une flamme froide très intense qui est faible voire absente, selon la richesse, lors de l'oxydation de cet hydrocarbure pur.

D'autre part la totalité des intermédiaires détectés lors de l'oxydation des différents mélanges ont été préalablement observés lors des études de l'oxydation des 3 hydrocarbures purs. Cela tend à montrer que les principales interactions entre leurs mécanismes d'oxydation ont lieu au travers du réservoir commun de petits radicaux (C_0-C_4).

L'ensemble de ces résultats a permis de compléter la base de données expérimentales disponibles pour l'oxydation des hydrocarbures en réacteur auto-agité. Ces nouvelles données, ainsi que celles disponibles dans la littérature, vont nous permettre de développer et de valider un modèle cinétique d'oxydation de ces 3 hydrocarbures et de leurs mélanges.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

© 2009 Tous droits réservés.

http://doc.univ-lille1.fr

RÉFÉRENCES

[1] C. Balès-Guéret, M. Cathonnet, J.-C. Boettner and F. Gaillard

Experimental study and kinetic modeling of higher hydrocarbons oxidation in a jet-stirred flow reactor, Energy&Fuels, 1992, vol. 6, pp. 189-194

[2] P. Dagaut, M. Reuillon and M. Cathonnet

High pressure oxidation of liquid fuels from low to high temperature. 3.n-decane, Combustion Science and Technology, 1994, vol. 103, pp.349-359

[3] P. Dagaut, A. El-Bakali and A. Ristori

The combustion of kerosene: Experimental results and kinetic modelling using 1- to 3-component surrogate model fuels, Fuel, 2006, vol. 85, pp. 944-956

[4] A. Ristori

Modélisation de la combustion du gazole. Étude des aspects chimiques, Thèse, Université d'Orléans, 2000

[5] A. Ristori, P. Dagaut, A. El Bakali and M. Cathonnet

The oxidation of n-propylcyclohexane: experimental results and kinetic modelling, Combustion Science and Technology, 2001, vol. 165, pp. 197-228

[6] K. Mati

Cinétique de combustion du gazole. Étude des aspects chimiques, Thèse, Université d'Orléans, 2005

[7] P. J. Bennett, D. Gregory and R. A. Jackson

Mechanistic studies on the combustion of isotopically labelled cyclohexane within a single cylinder internal combustion engine, Combustion Science and Technology, 1996, vol. 115, pp.83-103

[8] O. Lemaire, M. Ribaucour, M. Carlier and R. Minetti

The production of benzene in the low-temperature oxidation of cyclohexane, cyclohexene and cyclohexa-1,3-diene, Combustion and Flame, 2001, vol. 127, pp. 1971-1980

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[9] K. Brezinsky, G. T. Linteris, T. A. Litzinger and I. Glassman

High temperature oxidation of n-alkyl benzenes, Proceedings of the Combustion Institute, 1986, vol. 21, pp. 833-840

[10] A. Piperel, X. Montagne, and P. Dagaut

HCCI engine combustion control using EGR: gas composition evolution and consequences on combustion processes, 2007, SAE Paper 2007-24-0087

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

CHAPITRE V : DÉVELOPPEMENT ET VALIDATION D'UN MODÈLE CINÉTIQUE

Introduction **171**

1. Sous-mécanisme C_0-C_4 **173**

1.1 Base C_0-C_2 173

1.2 Sous-mécanisme C_3-C_4 175

1.3 Dépendance en pression 177

1.4 Influence des modifications apportées 177

2. Le sous-mécanisme d'oxydation du n-décane **178**

2.1 Origine du sous-mécanisme initial 178

2.2 Modifications effectuées 179

a) distinction des isomères *180*

b) modifications des voies réactionnelles *181*

c) réévaluation des constantes de vitesse *183*

2.3 Simulations en réacteur auto-agité 186

a) confrontation modèle-expérience *186*

b) analyse de voies réactionnelles *191*

c) analyse de sensibilité *195*

d) validation supplémentaire en réacteur auto-agité *197*

2.4 Modélisation en réacteur à écoulement 199

2.5 Simulations en tube à choc 201

3 Le sous-mécanisme d'oxydation du n-propylcyclohexane **203**

3.1 Mécanisme de haute température 204

3.2 Mécanisme de basse température 205

a) schéma cinétique *205*

b) paramètres cinétiques *206*

3.3 Confrontation modèle-expérience en réacteur auto-agité 210

a) oxydation du cyclohexane *210*

b) oxydation du n-propylcyclohexane *211*

c) analyse de voies réactionnelles *216*

d) analyse de sensibilité *221*

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

4 Le sous-mécanisme d'oxydation du n-butylbenzène 223

4.1 Le mécanisme de Ribaucour *et al* 223

4.2 Construction du sous-mécanisme d'oxydation du n-butylbenzène 224

a) base aromatique benzène-propylbenzène 224

b) sous-mécanisme de basse température 225

c) sous-mécanisme de haute température 227

4.3 Simulations en réacteur auto-agité 229

a) oxydation du benzène, toluène et propylbenzène 229

b) oxydation du butylbenzène 233

c) analyse de voies réactionnelles 238

d) analyse de sensibilité 241

4.4 Simulation en réacteur à écoulement 243

5. Oxydation des mélanges binaires et ternaire 244

5.1 Élaboration du mécanisme global-Réactions d'interaction 244

5.2 Oxydation du mélange n-décane/n-propylcyclohexane 60/40 (mole/mole) 245

a) confrontation modèle-expérience 245

b) analyse de voies réactionnelles 250

c) analyse de sensibilité 250

5.3 Oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène 60/40 (mole/mole) 251

a) confrontation modèle-expérience 251

b) analyse de voies réactionnelles 252

c) analyse de sensibilité 252

5.4 Oxydation du mélange ternaire 258

a) confrontation modèle-expérience 258

b) analyse de voies réactionnelles 258

c) analyse de sensibilité 263

Conclusion 265

Références bibliographiques 267

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

INTRODUCTION

Au chapitre précédent ont été exposé les résultats expérimentaux obtenus pour l'oxydation du n-décane, du n-propylcyclohexane, du n-butylbenzène et de leurs mélanges. Si ces résultats nous ont permis de déterminer certaines caractéristiques de l'oxydation de ces hydrocarbures, ils constituent surtout une base de donnée appréciable pour la validation de modèles cinétiques.

Nous avons vu au chapitre II qu'il existe peu de modèles cinétiques d'oxydation du butylbenzène et du propylcyclohexane dans la littérature. De plus aucun de ces modèles n'envisage à la fois la chimie d'oxydation de basse et de haute température de ces composés. Les mécanismes d'oxydation du n-décane sont plus nombreux mais ont des difficultés à simuler l'oxydation de basse température de cet hydrocarbure en réacteur auto-agité.

Dans ce chapitre nous nous intéressons au développement d'un modèle cinétique détaillé d'oxydation des 3 hydrocarbures de cette étude. Nous décrirons la genèse de ce mécanisme, et l'utiliserons ensuite pour la simulation des résultats expérimentaux obtenus au cours de cette étude et de certaines données issues de la littérature.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

© 2009 Tous droits réservés.

http://doc.univ-lille1.fr

1. Sous-mécanisme C_0-C_4

Si l'on considère le schéma d'oxydation d'un hydrocarbure quelconque, on s'aperçoit que les réactions mises en jeu peuvent être classées selon 2 catégories: d'un côté, les réactions spécifiques à l'hydrocarbure initial, et qui font intervenir des espèces possédant un nombre important d'atomes de carbone, et d'un autre côté les réactions communes à tous les hydrocarbures dans lesquelles interviennent des espèces de faible taille (C_0-C_3). Ainsi, schématiquement (cf. figure V.1), le mécanisme cinétique d'oxydation d'un hydrocarbure se compose d'un noyau commun à toutes les espèces fortement hiérarchisé auquel se greffe une partie spécifique à la molécule initiale.

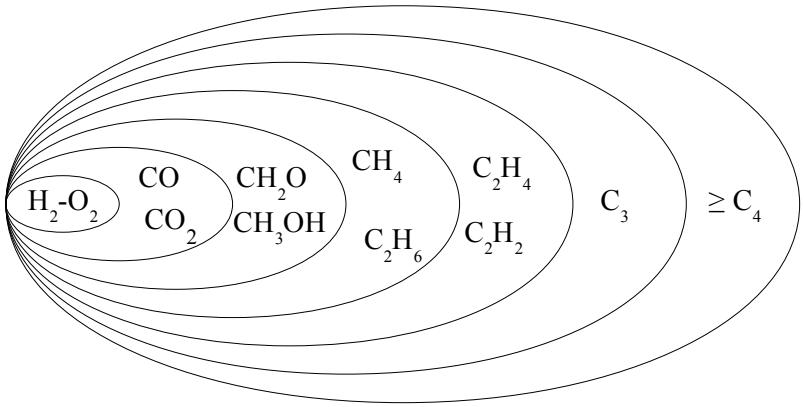


Figure V.1: Structure schématique des mécanismes d'oxydation des hydrocarbures lourds

Ce noyau commun a une forte influence sur l'oxydation des hydrocarbures de taille plus importante, et doit donc être validé sur de nombreux résultats couvrant un large domaine de température et de pression. Parmi les modèles disponibles dans la littérature et pouvant être utilisés comme base commune, les mécanismes d'oxydation du gaz naturel sont des bons points de départ. On peut ainsi citer le mécanisme de Konnov [1], celui de Leeds [2] ou le modèle GRI 3.0 [3]. Dans cette étude, nous nous sommes basés sur le modèle développé par Le Cong en 2007 [4].

1.1 base C_0-C_2

La partie C_0-C_2 du mécanisme de Le Cong [4] a été utilisée telle quelle, mais quelques modifications y ont tout de même été apportées afin d'obtenir un meilleur accord expérience-modélisation pour les composés concernés par cette étude. Le tableau ci-dessous présente les réactions concernées, les anciennes et nouvelles constantes de vitesse et l'origine des nouveaux paramètres utilisés.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Réaction	**Constante de vitesse utilisée par Le Cong [4]**	**Constante de vitesse utilisée lors de ce travail**	**Référence**
$CH_4+O_2=CH_3+HO_2$	$k_{rev}=1,0.10^{12}$	$4,0.10^{13}.exp(-56900/RT)$	Baulch, 1992 [5]
$CH_3+OH=sCH_2+H_2O$	$8,9.10^{18}.T^{-1,8}.exp(-8067/RT)$	$7,2.10^{13}.exp(-2780/RT)$	Baulch, 1992 [5]
$CH_2O+OH=HCO+H_2O$	$1,0.10^{13}.exp(-605/RT)$	$1,76.10^{9}.T^{-1,18}.exp(-447/RT)$	Tsang-Hampson, 1986 [6]
$CH_2O+CH_3=HCO+CH_4$	$8,14.10^{12}.exp(-8843/RT)$	$7,8.10^{-8}.T^{-6,1}.exp(-1970/RT)$	Baulch, 1994 [7]
$CH_3O_2+HO_2=CH_3O_2H+O_2$	$1,81.10^{11}.exp(-1431/RT)$	$2,9.10^{11}.exp(-1552/RT)$	Raventos-Duran, 2007 [8]
$C_2H_5+O_2=C_2H_4+HO_2$	$3,0.10^{20}.T^{-2,9}.exp(-6761/RT)$	$k_\infty=6,85.10^{12}.T^{6,53}.exp(834/RT)$ $k_0=2,79.10^{18}.exp(-755/RT)$ Troe (0,76 40,0 1025,0)	Miller, 2001 [9]
$C_2H_5+O_2=C_2H_5O_2$	$5,17.10^{35}.T^{-7,6}.exp(-6033/RT)$	$7,62.10^{38}.T^{-9,22}.exp(-5226/RT)$	DeSain, [10]
$C_2H_4+O=CH_3+HCO$	$4,0.10^{6}.T^{1,9}.exp(-184/RT)$	$1,2.10^{8}.T^{1,44}.exp(-530/RT)$	Fontijn, 1987 [11]
$C_2H_4+O=CH_2HCO+H$	$2,5.10^{7}.T^{1,9}.exp(-184/RT)$	$2,0.10^{8}.T^{1,44}.exp(-530/RT)$	Fontijn, 1987 [11]
$C_2H_4+H=C_2H_3+H_2$	$3,36.10^{-7}.T^{6}.exp(-1692/RT)$	$4,49.10^{7}.T^{2,12}.exp(-13366/RT)$	Konnov, 2007 [1]
$C_2H_5O_2+C_2H_6=C_2H_5O_2H+C_2H_5$	$2,95.10^{11}.exp(-15000/RT)$	$1,23.10^{13}.exp(-20470/RT)$	Curran, 2002 [12]
$2C_2H_5O_2H=2C_2H_5O+O_2$	$1,26.10^{11}.exp(-497/RT)$	$1,4.10^{16}.T^{-1,61}.exp(-1860/RT)$	Curran, 2002 [12]
$C_2H_5O_2H=C_2H_5O+OH$	$6,3.10^{14}.exp(-42300/RT)$	$4,0.10^{15}.exp(-43000/RT)$	Curran, 2002 [12]

Tableau V.1: Modifications apportées à la base réactionnelle C_0-C_2 du mécanisme de Le Cong [4] (unités: cm^3, s, cal, mol, K)

Outre ces modifications nous avons également ajouté quelques réactions qui concernent des espèces formées à basse température essentiellement et qui donc n'intervenaient quasiment pas dans les conditions pour lesquelles le mécanisme de Le Cong avait été validé. Ces ajouts sont indiqués dans le tableau suivant:

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Réaction	**Constante de vitesse utilisée lors de ce travail**	**Référence**
$CH_3O_2H+OH=CH_3O_2+H_2O$	$1{,}15.10^{12}$.exp(380/RT)	Konnov, 2007 [1]
$CH_3O_2H+O=CH_3O_2+OH$	$2{,}0.10^{13}$.exp(-4750/RT)	Konnov, 2007 [1]
$CH_3O_2H+H=CH_3O_2+H_2$	$8{,}8.10^{10}$.exp(-1860/RT)	Nicolle, 2005 [13]
$CH_3O_2H+H=CH_3O+H_2O$	$8{,}2.10^{10}$.exp(-1860/RT)	Nicolle, 2005 [13]
$C_2H_4+HO_2=CH_3HCO+OH$	$6{,}02.10^{9}$.exp(-7950/RT)	Tsang-Hampson, 1986 [6]
$C_2H_3+O_2=C_2H_2+HO_2$	$3{,}25.10^{19}.T^{-2,26}$.exp(-7932/RT) (à 10 bar)	Bozzelli, [14]
$C_2H_5O_2+CH3=C_2H_5O+CH_3O$	$8{,}17.10^{12}$.exp(906/RT)	DeSain, [10]
$C_2H_5O_2=C_2H_4+HO_2$	$3{,}57.10^{4}.T^{2,32}$.exp(-27955/RT)	Miller, 2001 [9]
$C_2H_5O_2+C_2H_4=C_2H_5O_2H+C_2H_3$	$2{,}23.10^{12}$.exp(-17190/RT)	Curran, 2002 [12]
$C_2H_5O_2+CH3OH=C_2H_5O_2H+CH_3O$	$1{,}81.10^{12}$.exp(-13710/RT)	Curran, 2002 [12]
$C_2H_5O_2+C_2H_4O=C_2H_5O_2H+ C_2H_3O$	$1{,}13.10^{13}$.exp(-30430/RT)	Curran, 2002 [12]
$C_2H_5O_2+C_3H_6=C_2H_5O_2H+aC_3H_5$	$3{,}24.10^{11}$.exp(-14900/RT)	Curran, 2002 [12]
$C_2H_5O_2+C_3H_8=C_2H_5O_2H+nC_3H_7$	$1{,}7.10^{13}$.exp(-20460/RT)	Curran, 2002 [12]
$C_2H_5O_2+C_3H_8=C_2H_5O_2H+iC_3H_7$	$2{,}0.10^{12}$.exp(-17000/RT)	Curran, 2002 [12]
$C_2H_5O_2+C_4H_8=C_2H_5O_2H+CC_4H_7$-1	$1{,}4.10^{12}$.exp(-14900/RT)	Curran, 2002 [12]
$C_2H_5O_2H+O=C_2H_5O_2+OH$	$2{,}0.10^{13}$.exp(-4750/RT)	Konnov, 2007 [1]
$C_2H_5O_2H+OH=C_2H_5O_2+H_2O$	$2{,}0.10^{12}$.exp(370/RT)	Konnov, 2007 [1]

Tableau V.2: Réactions ajoutées à la base réactionnelle C_0-C_2 du mécanisme de Le Cong [4] (unités: cm^3, s, cal, mol, K)

1.2 Sous-mécanisme C_3-C_4

Parmi les réactions communes à la grande majorité des hydrocarbures se trouvent celles des espèces comprenant 3 atomes de carbone. Dans cette étude, le sous-mécanisme C_3 utilisé provient des travaux de Yahyaoui [15] (celui du mécanisme de Le Cong en est cependant très proche), mais quelques modifications ont toutefois été apportées.

Le sous-mécanisme C_3 a été complété avec les réactions de basse température des radicaux propyles, réactions extraites du mécanisme de l'heptane de Curran [12]. Certaines constantes de

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

vitesse ont cependant été réévaluées, et plus particulièrement les constantes de vitesse des réactions d'addition des radicaux propyles et hydroperoxypropyles avec l'oxygène.

Réaction	k (1 atm)	k (10 atm)	
ch3+oh=ch2oh+h	$2{,}64.10^{19}.T^{-1{,}8}exp(-8068/RT)$	$1{,}99.10^{19}.T^{-1{,}68}exp(-11157/RT)$	Dean, 1987 [16]
ch3+oh=ch3o+h	$5{,}74.10^{12}.T^{-0{,}23}exp(-13931/RT)$	$9{,}95.10^{14}.T^{-0{,}82}exp(-16872/RT)$	
ch3+oh=ch2o+h2	$3{,}19.10^{12}.T^{-0{,}53}exp(-10810/RT)$	$7{,}39.10^{14}.T^{-1{,}13}exp(-14551/RT)$	
c2h3+o2=ch2hco+o	$2{,}46.10^{15}.T^{-0{,}78}exp(-3135/RT)$	$3{,}81.10^{17}.T^{-1{,}36}exp(-5580/RT)$	Bozzelli, 1993 [14]
c2h3+o2=ch2o+hco	$1{,}09.10^{23}.T^{-3{,}29}exp(-3892/RT)$	$3{,}71.10^{25}.T^{-3{,}96}exp(-7043/RT)$	
c2h3+o2=chocho+h	$1{,}91.10^{18}.T^{-2{,}25}exp(-2398/RT)$	$7{,}78.10^{20}.T^{-2{,}94}exp(-5541/RT)$	
c2h3+o2=c2h2+ho2	$5{,}19.10^{15}.T^{-1{,}26}exp(-3310/RT)$	$3{,}25.10^{19}.T^{-2{,}26}exp(-7932/RT)$	
c3h3+c3h3=c6h5+h	$1{,}70.10^{48}.T^{-9{,}98}exp(-36755/RT)$	$3{,}67.10^{26}.T^{-3{,}88}exp(-28960/RT)$	Miller, 2003 [17]
c3h3+c3h3=c6h6	$3{,}16.10^{55}.T^{-12{,}55}exp(-22264/RT)$	$3{,}89.10^{50}.T^{-11{,}01}exp(-20320/RT)$	
c3h3+c3h3=fulvene	$6{,}31.10^{59}.T^{-13{,}8}exp(-24953/RT)$	$1{,}07.10^{61}.T^{-13{,}96}exp(-28084/RT)$	
	$2{,}55.10^{32}.T^{-6{,}35}exp(-5432/RT)$	$3{,}20.10^{28}.T^{-5{,}04}exp(-4517/RT)$	
	$5{,}49.106^{2}.T^{-14{,}7}exp(-25602/RT)$	$5{,}62.10^{60}.T^{-13{,}93}exp(-27093/RT)$	
	$3{,}02.10^{35}.T^{-7{,}37}exp(-5963/RT)$	$7{,}98.10^{29}.T^{-5{,}5}exp(-4665/RT)$	
fulvene=c6h6	$1{,}44.10^{45}.T^{-8{,}9}exp(-96999/RT)$	$2{,}95.10^{31}.T^{-5{,}5}exp(-88465/RT)$	
fulvene=c6h5+h	$2{,}24.10^{68}.T^{-14{,}65}exp(-145270/RT)$	$8{,}51.10^{24}.T^{-2{,}5}exp(-13330/RT)$	
nc4h5+c2h2=c6h6+h	$7{,}83.10^{15}.T^{-1{,}0}exp(-8901/RT)$	$1{,}69.10^{16}.T^{-1{,}03}exp(-8968/RT)$	Senosiain et Miller, 2007 [18]
nc4h5+c2h2=fulvene+h	$4{,}63.10^{15}.T^{-0{,}89}exp(-9143/RT)$	$1{,}74.10^{19}.T^{-1{,}86}exp(-12384/RT)$	
ic4h5+c2h2=c6h6+h	$1{,}67.10^{23}.T^{-3{,}3}exp(-24961/RT)$	$8{,}25.10^{24}.T^{-3{,}76}exp(-26565/RT)$	
ic4h5+c2h2=fulvene+h	$6{,}81.10^{24}.T^{-3{,}45}exp(-20339/RT)$	$9{,}74.10^{26}.T^{-3{,}76}exp(-21329/RT)$	

Tableau V.3: Réactions présentant une dépendance en pression, exprimée sous forme de constantes de vitesse variable selon la pression (unités: cm^3, s, cal, mol, K)

Le mécanisme d'oxydation des hydrocarbures linéaires à 4 atomes de carbone a également été ajouté au noyau commun. Les réactions utilisées proviennent également en majeure partie du

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

mécanisme de Yahyaoui [15]. Un mécanisme d'oxydation de basse température des radicaux butyles a également été introduit, mais sera décrit plus précisément dans la partie traitant du sous-mécanisme d'oxydation du n-décane.

1.3 Dépendance en pression

Parmi les réactions présentes dans le mécanisme, certaines dépendent de la pression. Cette dépendance a été écrite dans la plupart des cas en utilisant le formalisme de Lindemann ou celui de Troe. Cependant certaines constantes de vitesse n'ont pu être introduites sous cette forme, et il subsiste donc dans le présent mécanisme des réactions dont la constante de vitesse doit être modifiée selon la pression considérée. La liste de ces réactions est fournie de manière exhaustive dans le tableau V.3, ainsi que les constantes de vitesse associées à 1 et 10 atm.

1.4 Influence des modifications apportées.

Afin de vérifier la faible influence des modifications apportées précédemment, nous avons simulé les résultats de Dayma *et al* [19] concernant l'oxydation de mélanges gaz naturel/hydrogène en réacteur auto-agité. On peut voir sur la figure V.2 que le modèle de cette étude fournit des résultats en bon accord avec l'expérience, même s'il surestime légèrement la réactivité.

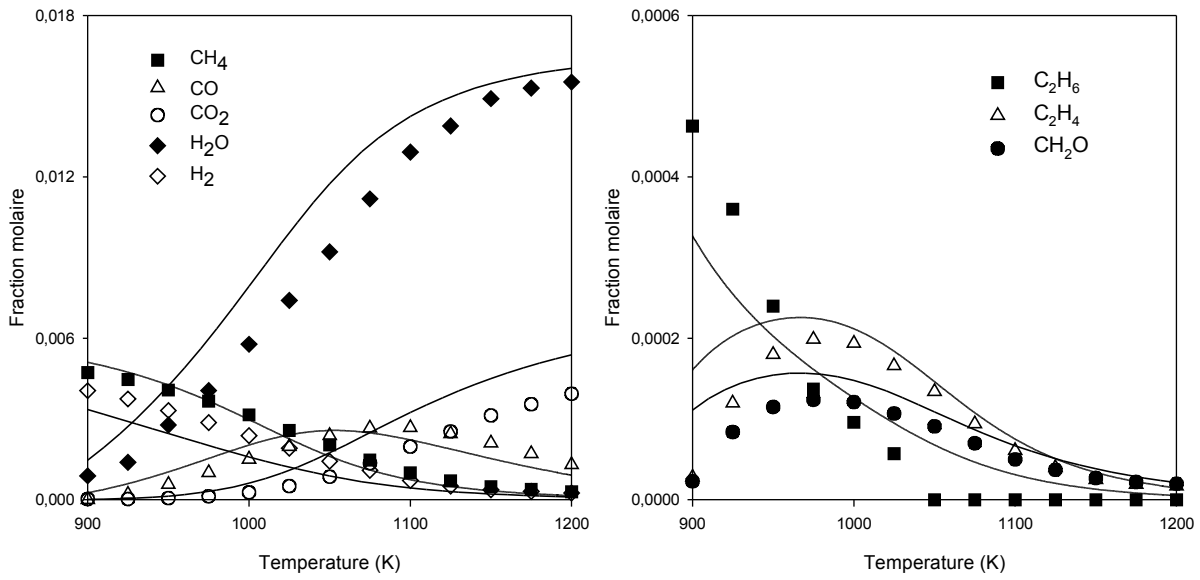


Figure V.2: Confrontation modèle-expérience: oxydation d'un mélange gaz naturel/hydrogène en réacteur auto-agité à 10 atm (4000 ppm H_2, 5479 de CH_4, 521 ppm de C_2H_6 et 24635 ppm de O_2 ; φ=0,3 et τ=250 ms)

Le modèle a également été testé en tube à choc en utilisant les données de Burcat [20] et celles de Petersen [21]. La figure V.3 montre que le modèle reproduit de manière convenable les

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

délais d'auto-inflammation expérimentaux. Cependant la réactivité prédite est trop faible lors de l'oxydation du butane et trop importante lors de celle de l'éthane.

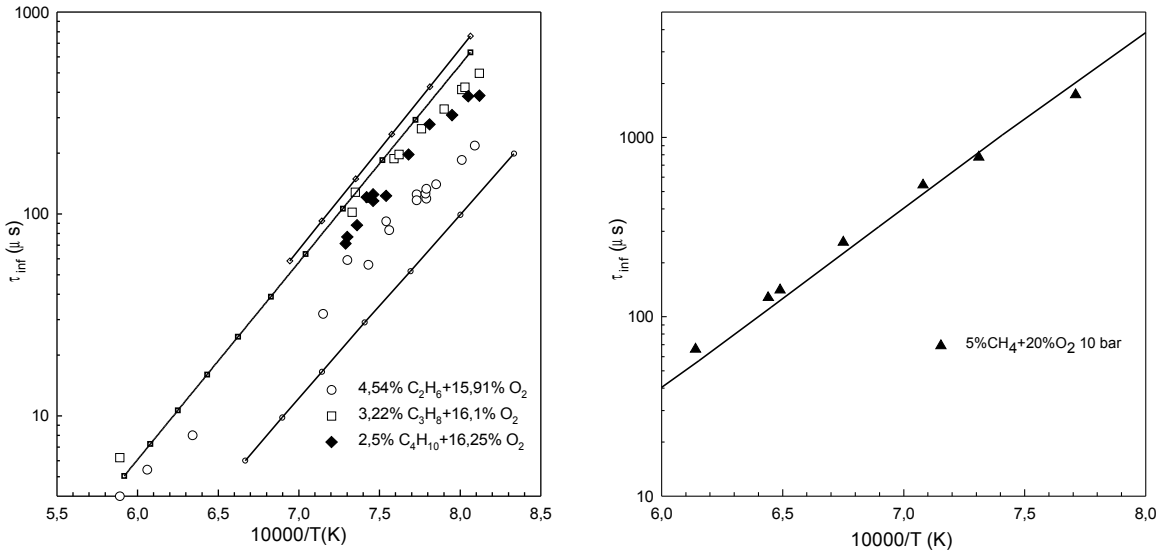


Figure V.3: Confrontation modèle-expérience: délais d'auto-inflammation en tube à choc de différents mélanges alcane-O_2 (éthane, propane, butane: données de Burcat *et al* [20] ; méthane: données de Petersen *et al* [21])

2. Le sous-mécanisme d'oxydation du n-décane

Nos recherches bibliographiques ont montré que de nombreux modèles d'oxydation du n-décane existent. Cependant la grande majorité de ces modèles ne développent que l'oxydation de haute température de cet alcane, et seulement quelques modèles, générés pour la plupart par des logiciels, tiennent compte des réactions de basse température.

Dans cette partie nous décrirons la genèse du mécanisme d'oxydation du décane développé durant cette étude. Ce modèle sera ensuite confronté aux données expérimentales présentées dans le chapitre précédent, mais également à des travaux de la littérature.

2.1 Origine du sous-mécanisme initial

Le sous-mécanisme utilisé dans cette étude repose sur celui généré par le logiciel Exgas (version 1.0). Exgas est un logiciel informatique développé par l'équipe du DCPR à Nancy. Il permet de générer des mécanismes cinétiques d'oxydation des hydrocarbures. Une description plus précise du logiciel est présentée dans l'article de Warth [22].

L'écriture d'un mécanisme par Exgas se déroule en 3 étapes. Tout d'abord le logiciel intègre sa base réactionnelle C_0-C_6 (comprenant également un sous-mécanisme du benzène et du toluène), puis

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

génère le mécanisme primaire détaillé du réactif initial (amorçages uni- et bimoléculaires, décomposition des radicaux par rupture C−C et C−H, réactions d'oxydation, de métathèse, d'isomérisation, de peroxydation, ...) formant des produits primaires (regroupés en fonction de leurs fonctions chimiques et de leur taille sous des espèces uniques). Enfin un mécanisme dit secondaire est écrit et permet la dégradation (via des réactions globales) des différents produits primaires. Ce logiciel est couplé aux deux logiciels Thergas [23] et Kingas [24], qui permettent respectivement de déterminer les propriétés thermodynamiques des espèces des mécanismes primaire et secondaire et d'estimer les constantes de vitesses des réactions de ces sous-mécanismes.

Le mécanisme généré par Exgas a été testé en simulant les données obtenues lors de cette étude (figure V.4). On peut constater que le modèle ne représente pas de manière satisfaisante les résultats expérimentaux. Il prévoit notamment une trop faible consommation de l'hydrocarbure initial et surestime fortement la concentration d'éthylène à basse température. Ce mécanisme n'est donc pas, en l'état, apte à être utilisé pour les simulations en réacteur auto-agité et doit par conséquent être modifié.

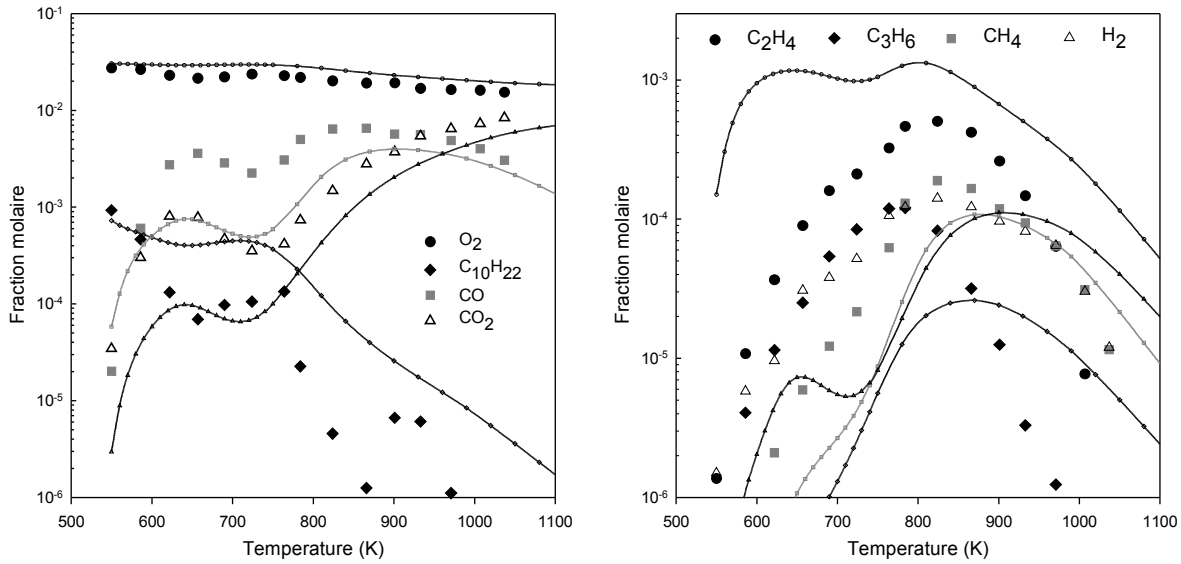


Figure V.4: Confrontation modèle généré par Exgas (lignes)-expérience (symboles): oxydation du n-décane en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de $C_{10}H_{22}$ et 31000 ppm de O_2 ; φ=0,50 et τ=1000 ms)

2.2 Modifications effectuées

Dans un premier temps nous avons substitué à la base C_0-C_4 du mécanisme généré par Exgas celle décrite précédemment, tout en conservant les réactions d'oxydation de basse température des

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

espèces à 4 atomes de carbone. Nous avons ensuite remplacé certaines réactions relatives à l'oxydation de haute température du n-décane (métathèses, décompositions) par celles du mécanisme de Mati [25], qui avait été validé en réacteur auto-agité. Ces quelques modifications n'ont cependant pas bouleversé les aptitudes du modèle en réacteur, et des modifications plus substantielles sur les mécanismes primaire et secondaire ont dû être apportées.

a) Distinction des isomères

Une des premières étapes fut tout d'abord de renommer les différentes espèces du mécanisme. En effet les noms attribués par Exgas ne permettent pas de déterminer rapidement la structure chimique de l'espèce, et donc rendent plus laborieux tout travail sur ce mécanisme.

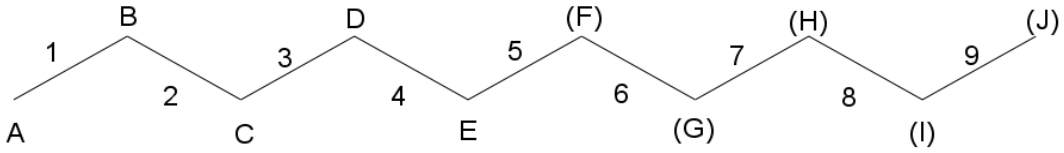


Figure V.5: Nomenclature utilisée dans le modèle: exemple du n-décane

La méthodologie adoptée ici a consisté à attribuer à chaque atome de carbone de la molécule de départ une lettre (écrite en capitale) et un chiffre à chaque liaison carbone-carbone. L'exemple dans le cas du décane est représenté ci-dessus. Ensuite chaque fonction ou groupe fonctionnel a été représenté dans la majorité des cas par une lettre ou un groupe de lettres (minuscules), par analogie avec le modèle de Curran [12]. Des exemples d'application de cette nomenclature sont indiqués dans le tableau V.4 pour des soucis de clarté.

On a vu que le mécanisme primaire généré par Exgas aboutissait à la formation d'espèces globalisées, regroupant sous un même nom plusieurs molécules de même formule brute et possédant les mêmes fonctions chimiques. L'étape suivante dans la modification du modèle fut donc de distinguer les différents isomères, et notamment les cétohydroperoxydes et les hétérocycles oxygénés. Cette distinction a été réalisée entièrement pour la sous-partie du décane, et de manière restreinte pour les sous-mécanismes du nonane au pentane (hétérocycles sous forme globale en fonction du nombre d'atomes de carbone et de la taille du cycle, pas de distinction des isomères des cétohydroperoxydes en C_8 et C_9 car la production des radicaux octyles et nonyles est faible) pour limiter la taille du mécanisme.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Nom	Formule développée
Cc10h21	
c10h20-3	
c10h21ojB	
c10h20rGqD	
c10h20o-BE	
c10h20qjEqC	
c10h19oCqD	

Tableau V.4: Nomenclature des espèces: exemples

L'introduction de toute nouvelle espèce dans un mécanisme nécessite d'en déterminer les propriétés thermodynamiques. Nous avons pour cela utilisé le logiciel Thergas [23], qui est également utilisé par Exgas.

b) Modification des voies réactionnelles

Comme on l'a indiqué précédemment, le modèle généré par Exgas surestime la production d'éthylène à basse température. A ces températures, une analyse de voies réactionnelles montre que C_2H_4 provient de la décomposition des hétérocycles oxygénés à 10 atomes de carbone, qui se décomposent selon:

c10h20o#5+oh → h2o+ch2hco+4c2h4

c10h20o#6+oh → h2o+ch2hco+4c2h4

Ce problème, ainsi que la distinction entre les différents isomères des cétohydroperoxydes et hétérocycles oxygénés, nous a amené à modifier leurs voies de décomposition. Nous proposons des voies de dégradation spécifiques à chaque isomère. Les voies choisies ne mènent jamais à la

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

formation de composés dicarbonylés dans le mécanisme primaire. Quelques exemples sont indiqués ci-dessous:

c10h19oAqC → oh+ch2hco+c7h15hco
c10h19oBqE → oh+ch3coc2h4+c5h11hco
c10h19oEqG → oh+nc3h7hco+ch2co+pc4h9

La dégradation de chaque cétohydroperoxyde engendre l'apparition de nouvelles espèces absentes du mécanisme initial. Des voies de dégradation de ces nouvelles espèces ont alors été écrites: une voie par rupture de liaison carbone-carbone ainsi qu'une voie via un mécanisme d'oxydation de basse température (peroxydation-isomérisation). Cependant pour cette dernière voie de dégradation, seules les réactions d'isomérisation faisant intervenir des cycles à 6 centres ont été considérées, sauf en présence d'hydrogènes labiles (en α des fonctions carbonyles par exemple).

Les voies de décomposition des éthers cycliques en C_{10} ont également été modifiées. Dans notre mécanisme, l'étape d'arrachement d'un atome hydrogène (métathèse) porté par un des atomes de carbone liés à l'oxygène est immédiatement suivie par une perte de la structure cyclique menant à la formation d'espèces carbonylées. Ces espèces vont à leur tour être dégradées soit par décomposition unimoléculaire C−C, soit par un mécanisme d'oxydation de basse température. Le mécanisme généré par Exgas envisageait quant à lui la dégradation des éthers cycliques par une réaction de métathèse immédiatement suivie d'une décomposition de l'espèce résultante en molécules à 1 ou 2 atomes de carbone, avec une production importante d'éthylène.

Certaines espèces en C_{10} et leurs réactions proposées par Exgas ont été supprimées sans pour autant nuire aux prévisions du modèle. Les espèces concernées sont les radicaux dihydroperoxyliques provenant de l'isomérisation des espèces O_2QO_2H, qui réagissaient par isomérisation ou rupture de liaisons O-O pour former des cétohydroperoxydes. Dans le mécanisme de cette étude, l'isomérisation de ces radicaux O_2QO_2H forme directement les cétohydroperoxydes. La vitesse de rupture de la liaison O-O des radicaux dihydroperoxyliques est supposée infiniment rapide par rapport à la vitesse de la réaction d'isomérisation, qui constitue donc l'étape limitante.

Dans le mécanisme de basse température des espèces C_4-C_9, la même démarche a été adoptée à quelques exceptions près. Premièrement dans le cas des hétérocycles oxygénés, les différents isomères n'ont pas été explicités. Seule la distinction dans la taille du cycle a été prise en compte. Par conséquent la réaction de métathèse sur ces composés est immédiatement suivie d'une décomposition du radical obtenu par décyclisation en hydrocarbures de taille inférieure. Les

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

composés formés sont alors les mêmes que ceux proposés par Exgas, excepté dans le cas des éthers cycliques à 5 centres. Dans ce cas précis, les produits correspondent à ceux formés lors de la décomposition de l'isomère formé majoritairement (déterminé lors des simulations par une analyse de voies réactionnelles). Deuxièmement, les différents isomères des cétohydroperoxydes en C_8 et C_9 n'ont pas été distingués mais regroupés sous un terme global. Cette espèce globale possède néanmoins plusieurs voies de dégradation possibles, correspondant à celles des isomères majoritaires.

réaction	**Isomère considéré**
c8h16o#5+R → RH+c6h12+ch2hco	2-butyltétrahydrofurane
c8h16o#5+R → RH+ch2co+pc4h9+c2h4	
c8h16o#5+R → RH+c5h10+ch2coch3	2-méthyl 5-propyltétrahydrofurane
c8h16o#5+R → RH+c3h6+ch2coc3h7	
c9h17oq → oh+ch2hco+c6h13hco	c9h17oAqC
c9h17oq → oh+hcoch2hco+Ac6h13	c9h17oAqC
c9h17oq → oh+choch2ch2hco+c5h11hco	c9h17oAqD
c9h17oq → oh+ch2ch2hco+c5h11hco	c9h17oAqD
c9h17oq → oh+ethco+ch2co+pc4h9	c9h17oDqC
c9h17oq → oh+ch3hco+c2h4+nc4h9co	c9h17oEqB

Tableau V.5: Exemples de réactions semi-globales utilisées pour la décomposition des éthers cycliques et des cétohydroperoxydes de taille comprise entre C_8 et C_9

c) Réévaluation des constantes de vitesse

Jusqu'à présent, les seules modifications apportées au modèle étaient d'ordre mécanistique, avec l'adjonction de nouvelles réactions et espèces. Nous nous intéresserons dans cette partie aux modifications cinétiques.

La première modification apportée concerne les réactions de peroxydation. En effet le logiciel Exgas estime ces constantes de vitesse au moyen d'une formule incrémentale tenant compte de l'environnement du site radicalaire. Nous avons choisi dans notre mécanisme d'utiliser pour ces

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

réactions les valeurs proposées par DeSain *et al* [10] pour les radicaux propyles. Ainsi l'addition de l'oxygène sur les radicaux secondaires s'effectue avec une constante de vitesse $k=1,84.10^{45}.T^{-11,1}.\exp(-6538/RT)$ et l'addition sur les radicaux primaires avec $k=4,82.10^{36}.T^{-8,23}.\exp(-5167/RT)$. Les constantes de vitesse proposées par DeSain *et al* se caractérisent par une dépendance plus marquée de la température, menant à une diminution plus rapide de l'importance de ces réactions avec la température.

La seule exception quant à l'utilisation de ces constantes concerne les radicaux décyles qui conservent les constantes de vitesse proposées par Exgas pour des raisons que nous évoquerons lors de la modélisation du mélange décane/butylbenzène.

Une autre modification importante concerne cette fois les vitesses des réactions d'isomérisation des radicaux RO_2 et O_2QO_2H. Les constantes de vitesse proposées par Exgas utilisent pour l'estimation du facteur préexponentiel l'équation V.1 proposée par Brocard [26]. Le logiciel détermine alors la valeur du facteur de fréquence à 800 K qu'il considère ensuite constant pour toutes les températures. Nous avons ici, comme dans les dernières versions de Exgas, introduit une constante de vitesse de type Arrhénius modifié dans laquelle la dépendance en température du facteur préexponentiel est isolée.

$$A = \frac{k_B T}{h} \times rpd \times \exp\left[1 + \frac{\Delta n_{i,rot}^{TS} \times 3,5}{R}\right] \qquad \text{Équation V.1}$$

L'estimation des énergies d'activation de ces réactions a été déterminée de la même manière que par le logiciel Exgas, à savoir qu'elle est égale à la somme de l'énergie due à l'arrachement de l'atome d'hydrogène et de l'énergie de cyclisation de l'état de transition. Les énergies de cyclisation utilisées sont celles proposées par Warth *et al* [22]. L'énergie d'arrachement de l'atome d'hydrogène peut être estimée de 2 manières. La première méthode repose sur l'utilisation de relations d'Evans-Polyani liant énergie d'activation et enthalpie de la réaction. La deuxième, que nous avons utilisée, consiste à utiliser les valeurs moyennes suggérées par Exgas et tenant compte du type (primaire, secondaire ou tertiaire) de l'atome de carbone portant l'atome d'hydrogène arraché. Dans le tableau V.6 sont indiquées les valeurs des facteurs préexponentiel et des énergies d'activation utilisées selon la taille du cycle et le type d'atome de carbone portant l'atome d'hydrogène dans le cas des réactions $RO_2 \leftrightarrows QO_2H$. Lorsque l'atome de carbone qui porte l'atome d'hydrogène est également lié à un atome d'oxygène, l'énergie d'activation est diminuée de 2000 $cal.mol^{-1}$.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Taille du cycle	4	5	6	7	8
A (par H) (s^{-1})	$9{,}735.10^{9}$	$1{,}673.10^{9}$	$2{,}875.10^{8}$	$4{,}943.10^{7}$	$8{,}495.10^{6}$
E_{abs} (H Ire) ($cal.mol^{-1}$)	43000	35500	28000	25000	24000
E_{abs} (H II^{re}) ($cal.mol^{-1}$)	40000	32500	25000	22000	21000
E_{abs} (H III^{re}) ($cal.mol^{-1}$)	37000	29500	22000	19000	18000

Tableau V.6: Paramètres cinétiques utilisés ($k=A.T.\exp(-E_{abs}/RT)$ pour les réactions du type $RO_2 \leftrightarrows QO_2H$

Les vitesses de formation des hétérocycles oxygénés ont également été modifiées. Les paramètres utilisés sont regroupés dans le tableau V.5 et sont comparés aux valeurs utilisées par Exgas et l'équipe de Curran [12].

Taille du cycle	**Exgas [22]**	**Curran [12]**	**Cette étude**
3	$6{,}1.10^{11}.\exp(-17950/RT)$	$6{,}1.10^{11}.\exp(-22000/RT)$	$2{,}95.10^{11}.\exp(-22000/RT)$
4	$9{,}1.10^{10}.\exp(-16600/RT)$	$7{,}5.10^{10}.\exp(-15250/RT)$	$2{,}5.10^{10}.\exp(-15250/RT)$
5	$3{,}6.10^{9}.\exp(-7000/RT)$	$9{,}38.10^{9}.\exp(-7000/RT)$	$2{,}1.10^{8}.\exp(-6500/RT)$
6	$1{,}7.10^{8}.\exp(-1950/RT)$	$1{,}17.10^{9}.\exp(-1800/RT)$	$1{,}5.10^{8}.\exp(-1800/RT)$

Tableau V.7: Constantes cinétiques utilisées pour les réactions de formation des éthers cycliques ($RO_2 \rightarrow QO\#+OH$)

Enfin, pour le mécanisme de basse température, les dernières modifications dont nous parlerons concernent les vitesses de décomposition des cétohydroperoxydes. La constante de vitesse utilisée est légèrement plus faible que celles proposées par Exgas [22] et Curran *et al* [12] et implique donc une décomposition un peu plus tardive de ces composés à basse température:

$$k(s^{-1}) = 1{,}5.10^{16}.\exp\left(-\frac{42000}{RT}\right) \qquad \text{Exgas [22], Curran } et\ al \text{ [12]}$$

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

$$k\,(s^{-1}) = 1{,}0.\,10^{16}.\exp\left(-\frac{43000}{RT}\right)$$ cette étude

Le mécanisme de haute température, issu des travaux de Mati [25], a subi quelques légers changements. Les vitesses de métathèse du décane avec le radical hydroperoxy HO_2 ont été modifiées, les nouvelles valeurs adoptées proviennent du modèle de Bikas et Peters [27]. Enfin, les constantes de vitesses des réactions d'amorçage unimoléculaire par rupture C−C proposées par Zeppieri *et al* [28] ont été adoptées. Ces modifications sont présentées dans le tableau V.8.

Réaction	**Ancienne valeur**	**Nouvelle valeur**	**référence**
nc10h22+ho2⇆Bc10h21+h2o2	$8{,}0.10^{12}$.exp(-17000/RT)	$4{,}0.10^{13}$.exp(-17021/RT)	Peters et Bikas [27]
nc10h22+ho2⇆Cc10h21+h2o2	$8{,}0.10^{12}$.exp(-17000/RT)	$4{,}0.10^{13}$.exp(-17021/RT)	
nc10h22+ho2⇆Dc10h21+h2o2	$8{,}0.10^{12}$.exp(-17000/RT)	$4{,}0.10^{13}$.exp(-17021/RT)	
nc10h22+ho2⇆Ec10h21+h2o2	$8{,}0.10^{12}$.exp(-17000/RT)	$4{,}0.10^{13}$.exp(-17021/RT)	
nc10h22⇆2Ac5h11	$1{,}0.10^{17}$.exp(-84400/RT)	$2{,}0.10^{17}$.exp(-83180/RT)	Zeppieri *et al* [28]
nc10h22⇆pc4h9+Ac6h13	$1{,}0.10^{17}$.exp(-82200/RT)	$2{,}0.10^{17}$.exp(-83180/RT)	
nc10h22⇆nc3h7+Ac7h15	$1{,}0.10^{17}$.exp(-84300/RT)	$2{,}0.10^{17}$.exp(-83400/RT)	
nc10h22⇆c2h5+Ac8h17	$1{,}0.10^{17}$.exp(-79900/RT)	$2{,}0.10^{17}$.exp(-83680/RT)	
nc10h22⇆ch3+Ac9h19	$1{,}0.10^{17}$.exp(-84400/RT)	$2{,}0.10^{17}$.exp(-85570/RT)	

Tableau V.8: Modifications apportées aux réactions de haute température du sous-mécanisme du décane (unités: cm^3, s, cal, mol, K)

2.3 *Simulations en réacteur auto-agité*

a) *Confrontation modèle-expérience*

Le mécanisme décrit précédemment a été utilisé pour modéliser les résultats obtenus durant cette étude en réacteur auto-agité. Les confrontations entre les résultats expérimentaux et le modèle sont représentées sur les figures V.6 (φ=0,25) et V.7 (φ=0,50). Nous avons également modélisé les données obtenues par Dagaut [29] dans les mêmes conditions (figure V.8, φ=1,00).

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

On peut constater que le modèle représente convenablement les résultats expérimentaux en milieu pauvre. Le modèle reproduit correctement le profil de décane pour des températures inférieures à 800 K, mais sous-estime ensuite la consommation du réactif initial. Le monoxyde de carbone et le dioxyde de carbone sont également bien simulés par le modèle, quelle que soit la température, même si CO est sous-estimé entre 800 et 900 K. Cette sous-estimation est chronique pour les profils des différents aldéhydes (méthanal, éthanal) mais l'accord global reste acceptable. Les alcènes, qui font partie des intermédiaires principaux de l'oxydation du décane, sont également bien estimés par le mécanisme, même si leur consommation n'est pas assez rapide au-delà de 800 K. On peut néanmoins noter que l'éthylène n'est plus surestimé comme c'était le cas avec le modèle initial généré par Exgas. On remarque également que le modèle reproduit parfaitement le profil de méthane. Concernant les produits de basse température, et notamment les tétrahydrofuranes substitués, le modèle s'avère incapable de reproduire convenablement les résultats expérimentaux. De même on peut noter que le modèle ne prévoit pas d'oxirane à basse température, pourtant observé expérimentalement.

En milieu stœchiométrique les résultats sont plus contrastés. Le modèle prévoit une consommation trop importante de l'hydrocarbure initial à basse température, et sous-estime l'amplitude du coefficient négatif de température induisant une surestimation de CO et CO_2. Par contre les profils des différents alcènes linéaires sont convenablement reproduits, même s'ils sont légèrement sous-estimés. De même, le formaldéhyde est bien reproduit par le modèle.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

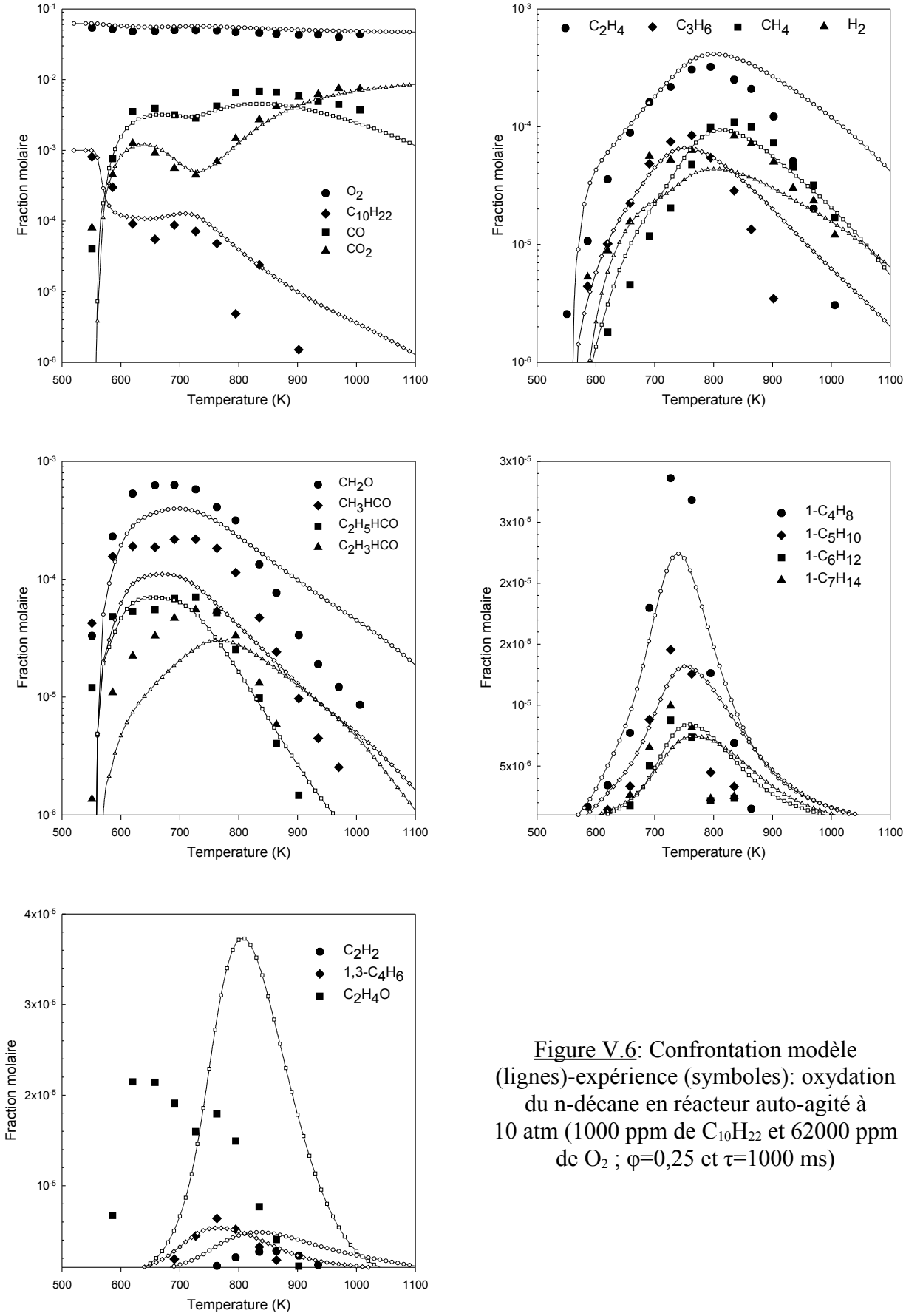


Figure V.6: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du n-décane en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de $C_{10}H_{22}$ et 62000 ppm de O_2 ; φ=0,25 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

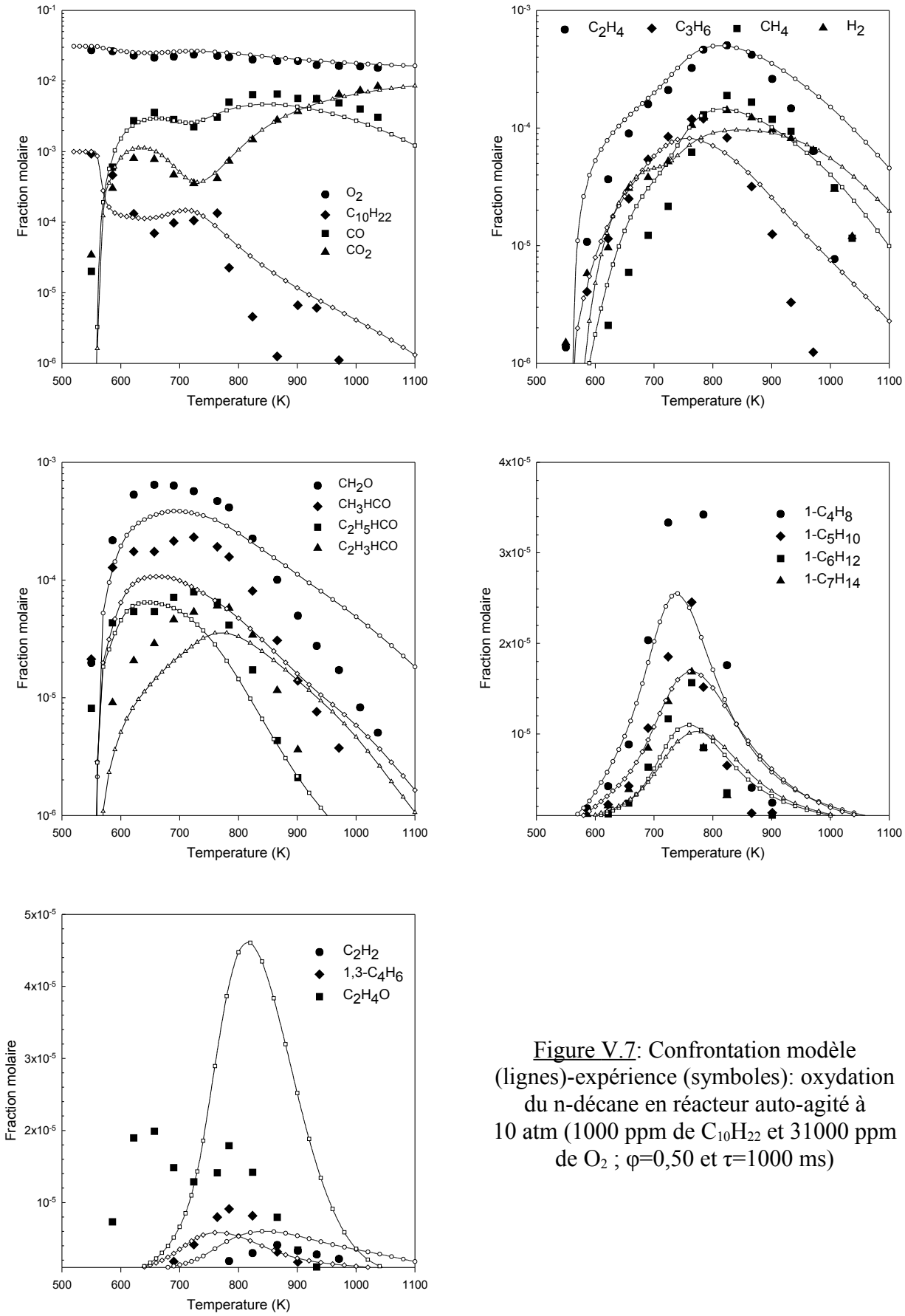


Figure V.7: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du n-décane en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de $C_{10}H_{22}$ et 31000 ppm de O_2 ; φ=0,50 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

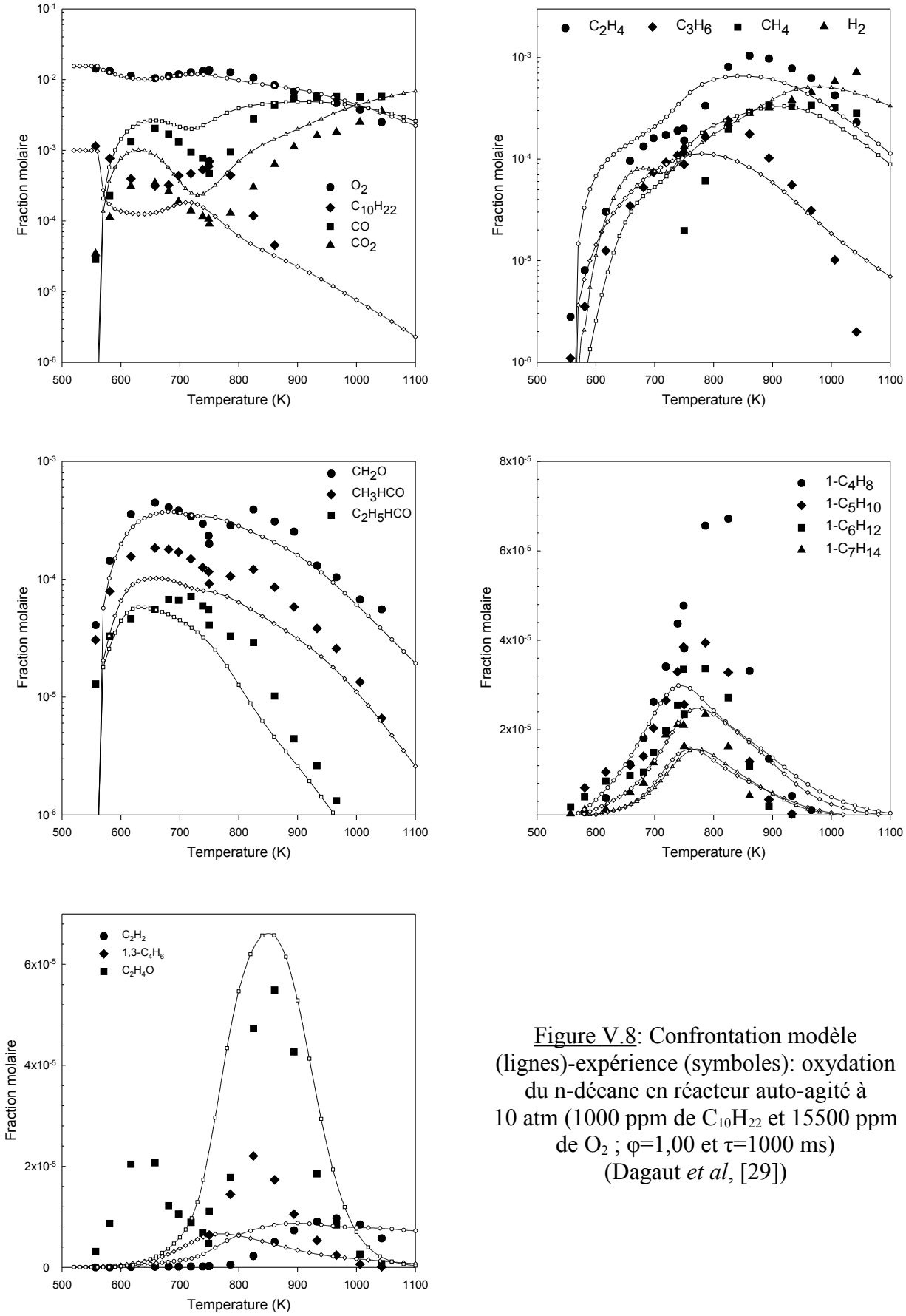


Figure V.8: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du n-décane en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de $C_{10}H_{22}$ et 15500 ppm de O_2 ; φ=1,00 et τ=1000 ms) (Dagaut *et al*, [29])

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

b) *Analyse de voies réactionnelles*

Maintenant que nous avons vu que le modèle reproduisait de manière convenable l'oxydation du décane en réacteur auto-agité, nous avons effectué une analyse de voies réactionnelles afin de déterminer les chemins de dégradation préférentiels de l'hydrocarbure initial.

- Les voies de décomposition du n-décane à 650 K à richesse 0,25 sont indiquées sur la figure V.9.

On peut voir que le décane réagit exclusivement par des réactions de métathèse avec le radical OH pour former les radicaux décyles (majoritairement les 3-, 4- et 5-décyles). Par la suite ces radicaux sont oxydés pour former des décènes (20%) ou additionnent l'oxygène pour former des radicaux peroxydécyles (75%). Ces radicaux $C_{10}H_{21}O_2$ s'isomérisent alors, essentiellement via des états de transition à 6 et 7 centres, pour former des radicaux hydroperoxydécyles. De nouvelles réactions d'isomérisation redistribuent les produits entre les différents isomères radicalaires, qui ensuite se décomposent pour donner des hétérocycles oxygénés ou fixent à leur tour une molécule d'oxygène.

Ces radicaux hydroperoxyperoxydécyles réagissent également par des réactions d'isomérisation pour former, après rupture d'une liaison O−O, des céto- ou aldohydroperoxydes. Ces molécules se décomposent alors par rupture initiale de leur liaison O-O et forment des composés carbonylés et des radicaux alkyles.

Les éthers cycliques formés réagissent par métathèse avec le radical OH et forment des radicaux oxodécyles qui fixent l'oxygène. Ces radicaux peroxy se décomposent, in fine, en composés carbonylés et dicarbonylés après isomérisation et nouvelle addition d'oxygène.

- Le schéma de dégradation du n-décane à 850 K et 10 atm est représenté sur la figure V.10.

Le décane est toujours consommé par des réactions de métathèse avec le radical OH, mais aussi avec le radical HO_2. A cette température, les radicaux décyles réagissent selon 4 voies différentes. Les réactions d'oxydation formant les décènes représentent en moyenne 40% de la consommation des radicaux décyles. L'addition de l'oxygène, générant les radicaux peroxydécyles, consomme désormais 20 à 25% des radicaux décyles. Les réactions de décomposition par β-scission constituent la 2ème voie principale (35%) de consommation des radicaux décyles, tandis que l'importance des réactions d'isomérisation est faible.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

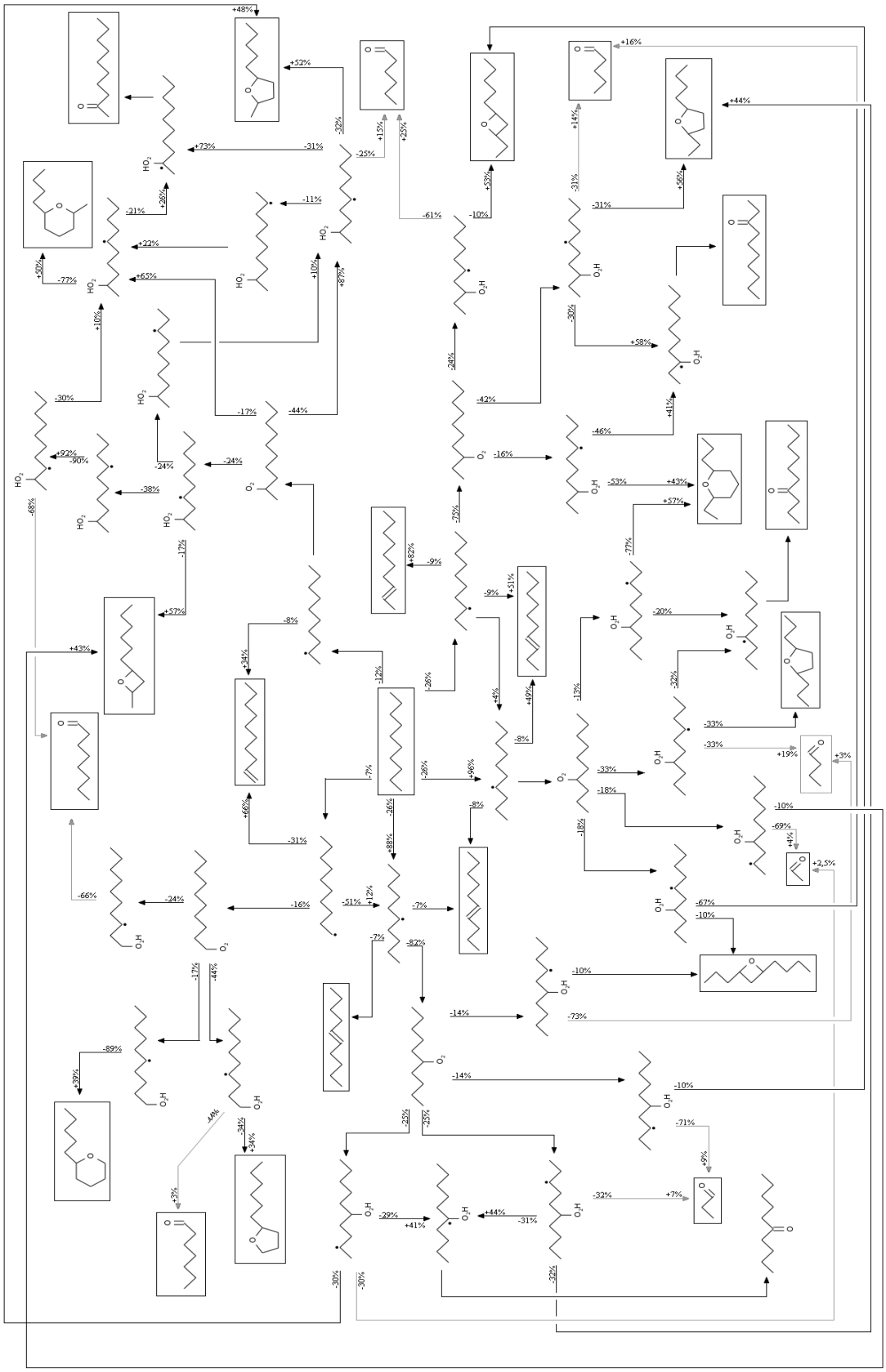


Figure V.9: Voies de dégradation principales du décane lors de l'oxydation d'un mélange décane/oxygène/azote (P=10 atm, φ=0,25) en réacteur auto-agité à T=650 K (les composés moléculaires sont encadrés, les flèches grises représentent les voies de dégradation passant par un cétohydroperoxyde)

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Les radicaux peroxydécyles s'isomérisent comme aux plus basses températures en radicaux hydroperoxydécyles. Cependant ces radicaux n'additionnent plus, ou alors en faible proportion, l'oxygène, mais réagissent majoritairement par des réactions d'isomérisation et de rupture de liaison O−O (formant des éthers cycliques ou des alcènes et des aldéhydes si une liaison C−C est également rompue).

Les décènes, formés uniquement à partir de l'oxydation des radicaux décyles, réagissent majoritairement (55%) par fixation sur la double liaison des radicaux OH et HO_2 et de l'atome d'oxygène pour former des aldéhydes. Les réactions de métathèse sont légèrement moins importantes et arrachent un atome d'hydrogène en position allylique.

- Les voies de dégradation du décane à 1030 K et une richesse de 0,25 sont représentées sur la figure V.30.

A cette température, le décane réagit principalement via des réactions de métathèse avec le radical OH pour former les différents radicaux décyles. Ces radicaux décyles peuvent ensuite réagir selon 3 voies différentes. Ils peuvent d'abord s'isomériser, donnant un radical décyle différent. L'importance de cette voie est variable mais peu représentée jusqu'à ¼ de la consommation du radical (cas du 3-décyle). La deuxième voie est celle aboutissant à la formation des décènes, qui a lieu exclusivement par une réaction d'oxydation. Cependant seule une faible proportion des radicaux décyles réagissent par cette voie. Enfin la voie de dégradation majoritaire est la rupture homolytique des liaisons C−C, formant un 1-alcène ainsi qu'un radical 1-alkyle. L'importance de cette voie pour la production des alcènes dépend du nombre d'atomes de carbone de l'alcène, et augmente avec la taille de la chaîne carbonée. A leur tour ces alcènes vont réagir essentiellement par métathèse avec le radical OH pour former des radicaux allyliques qui vont également se décomposer par β-scission.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

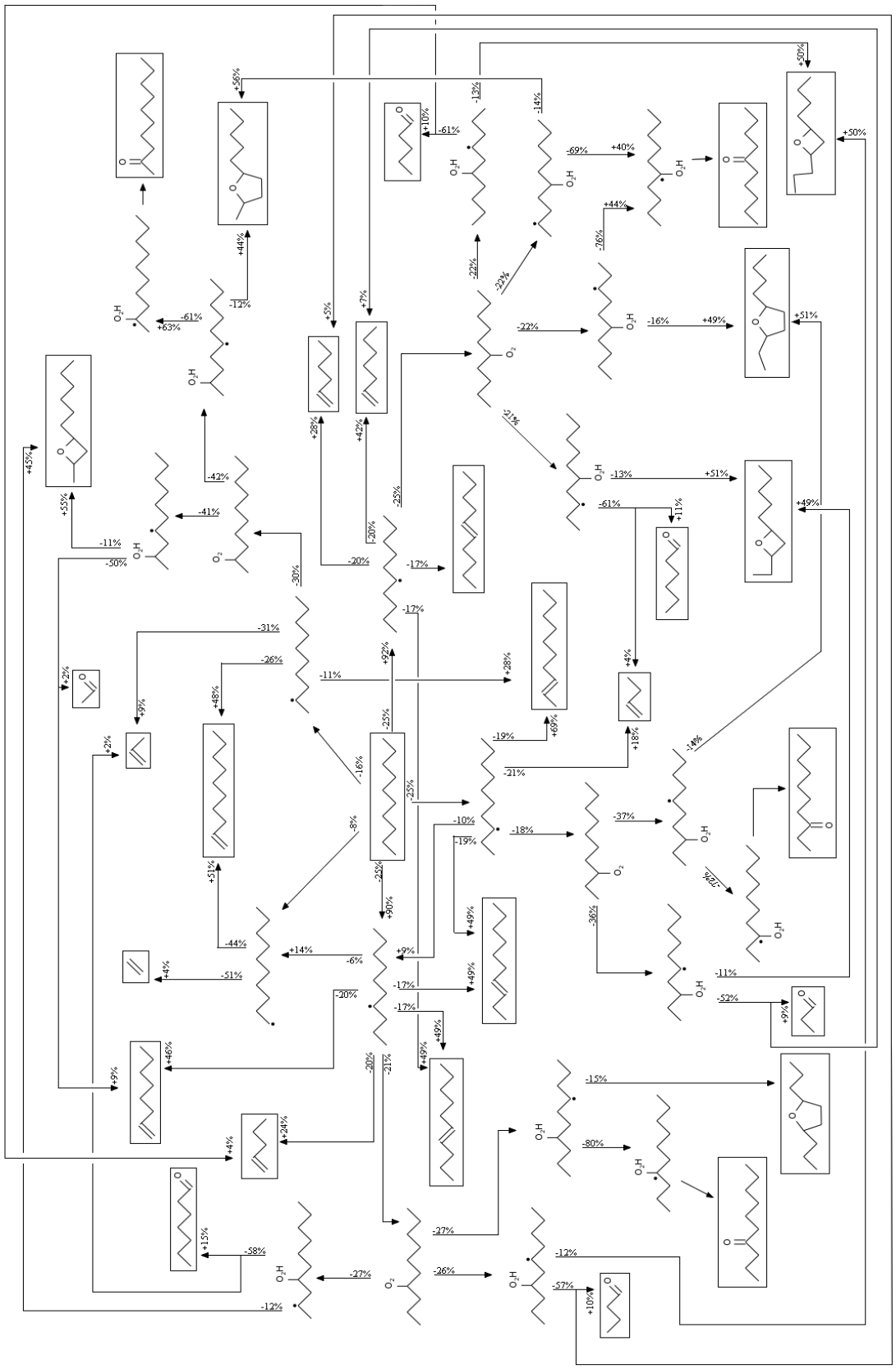


Figure V.10: Voies de dégradation principales du décane lors de l'oxydation d'un mélange décane/oxygène/azote (P=10 atm, φ=0,25) en réacteur auto-agité à T=850 K (les composés moléculaires sont encadrés, les flèches grises représentent les voies de dégradation passant par un cétohydroperoxyde)

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

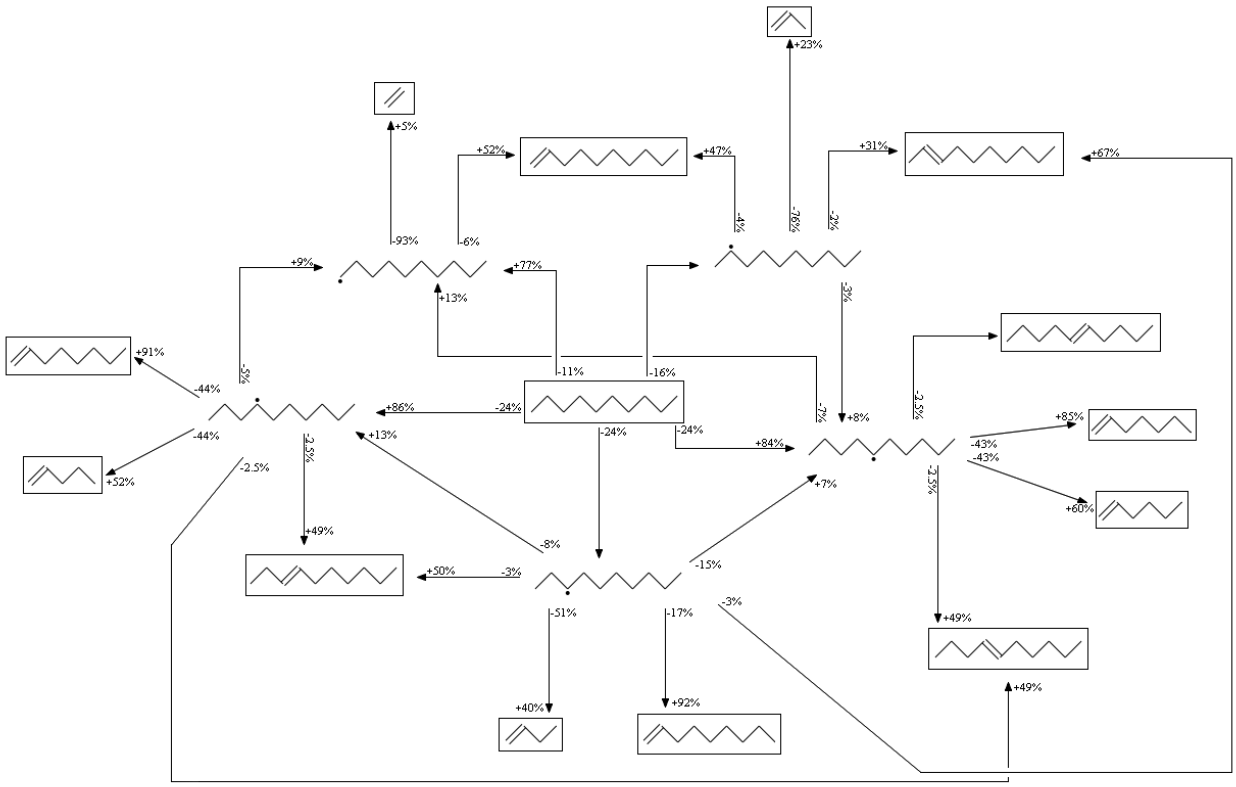


Figure V.11: Voies de dégradation principales du décane lors de l'oxydation d'un mélange décane/oxygène/azote (P=10 atm, φ=0,25) en réacteur auto-agité à T=1030 K (les composés moléculaires sont encadrés)

c) *Analyse de sensibilité*

Nous avons effectué grâce à notre modèle une analyse de sensibilité à une richesse de 0,25 pour déterminer les réactions les plus influentes. Les résultats sont présentés sur la figure V.12.

A basse température les réactions les plus sensibles sont les réactions de métathèse du décane avec le radical OH (R2763-2767). Ces réactions favorisent la consommation de l'hydrocarbure initial, et spécialement celles générant les radicaux 3-, 4- et 5-décyles. A ces températures, la réaction $CH_2O+OH = HCO+H_2O$ (R180) présente un coefficient de sensibilité positif: elle consomme en importante quantité (CH_2O est un des intermédiaires majoritaires) des radicaux OH très réactifs.

Dès 800 K les réactions précédentes voient leur influence diminuer (R180) ou stagner (R2763-2767) tandis que les réactions de la base C_0-C_2 deviennent de plus en plus influentes. Ainsi les réactions de ramification $C_2H_3 + O_2 = CH_2HCO + O$ (R5) et $H + O_2 = OH + O$ (R22) présentent des coefficients de sensibilité négatifs. L'influence de la réaction R22 augmente continuellement avec la température jusqu'à 1350 K alors que celle de la réaction R5 passe par un maximum à

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

900 K. Parmi les réactions présentant un coefficient de sensibilité positif, il y a les réactions $HO_2 + OH = H_2O + O_2$ (R32) et $H + O_2 + M = HO_2 + M$ (R23). L'effet de la réaction R32 est considérable et se comprend aisément: elle transforme 2 radicaux, dont un très réactif, en 2 molécules stables, ce qui entraîne une baisse globale de la réactivité. La réaction R23 est une réaction de recombinaison trimoléculaire consommant un atome d'hydrogène H pour former un radical hydroperoxyle (HO_2) moins réactif. Cette réaction entre en concurrence avec la réaction R22, et le coefficient de sensibilité de ces réactions évolue de manière opposée avec la température.

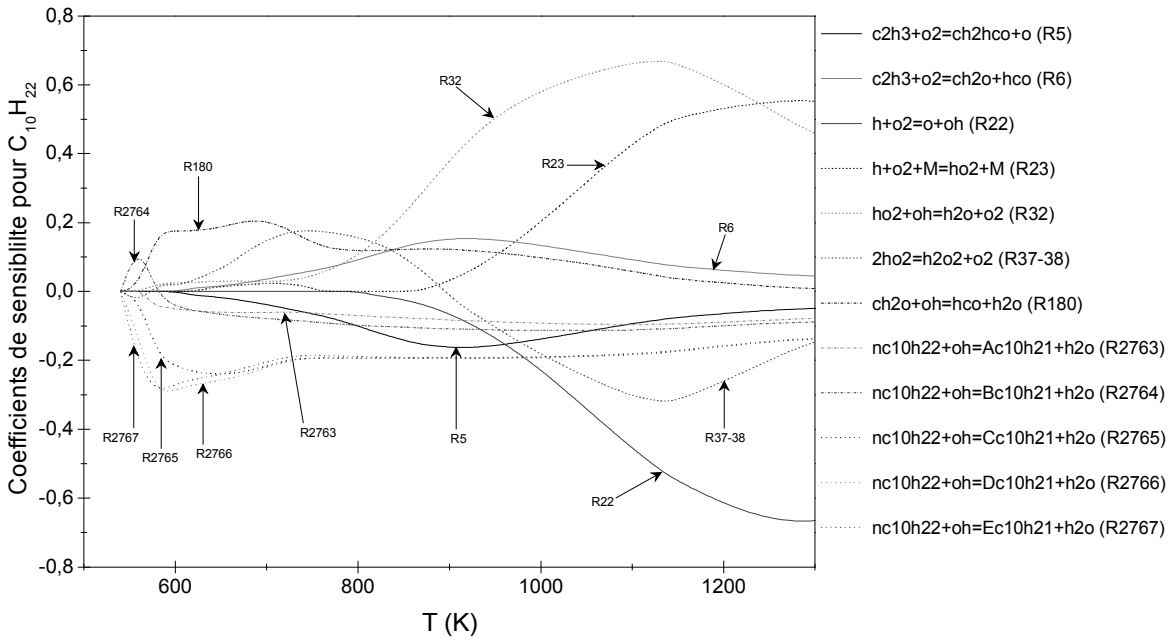


Figure V.12: Coefficients de sensibilité pour le décane lors de l'oxydation du n-décane en réacteur auto-agité à 10 atm et φ=0,25

Aux plus hautes températures (T>1300 K) les deux réactions R22 et R23 restent les plus influentes même si les réactions de décomposition unimoléculaire du décane ont alors un coefficient de sensibilité non négligeable.

Les réactions R37 et R38 ($2\ HO_2 = H_2O_2 + O_2$) présentent un comportement particulier. En dessous de 900 K, le coefficient de sensibilité associé est positif traduisant le fait que ces réactions ralentissent la consommation du décane, alors qu'au-delà elles favorisent la consommation de l'hydrocarbure initial. Cette réaction produit à partir de 2 radicaux HO_2 une molécule de peroxyde d'hydrogène H_2O_2. Cette molécule, produite en quasi-exclusivité par cette voie, peut être dégradée

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

de deux manières: soit par une réaction de métathèse redonnant un radical HO_2 soit par décomposition produisant 2 radicaux OH. Sur la figure V.13 est représentée la vitesse de ces deux voies de dégradation. On s'aperçoit alors que pour des températures inférieures à 750 K, H_2O_2 donne préférentiellement HO_2 et qu'au-delà la réaction de décomposition est majoritaire. Cette température de 750 K correspond au maximum du coefficient de sensibilité des réactions R37 et R38. De plus, au-delà de 900 K, température au delà de laquelle les réactions R37 et R38 ont un coefficient de sensibilité négatif, H_2O_2 se dégrade exclusivement par décomposition unimoléculaire.

Ainsi tant que H_2O_2 peut se dégrader en radical HO_2, même en faible proportion, les réactions R37 et R38 ralentissent la consommation du décane et ce d'autant plus que les réactions de métathèse de H_2O_2 sont importantes. Dès que H_2O_2 se décompose uniquement en 2 radicaux OH, les réactions R37 et R38 favorisent la consommation du décane.

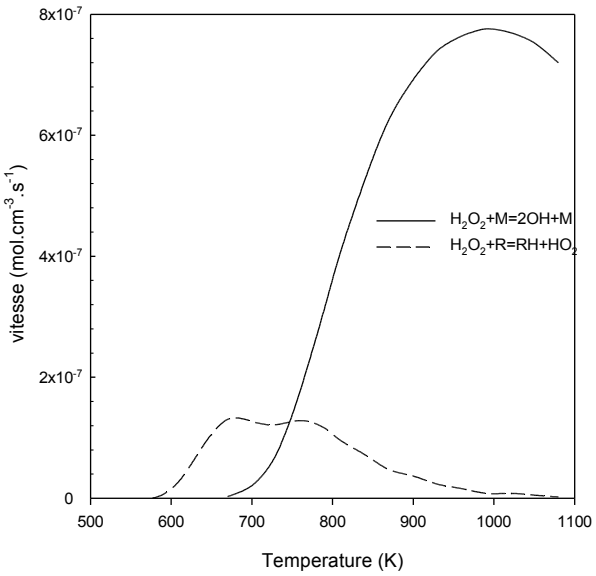


Figure V.13: Évolution des vitesses de consommation de H_2O_2 lors de l'oxydation du décane en réacteur auto-agité à 10 atm et φ=0,25

d) *Validation supplémentaire en réacteur auto-agité*

Nous avons vu lors du chapitre précédent que l'oxydation du décane avait été étudié antérieurement par Voisin [30] à 10 atm, mais avec un temps de passage de 500 ms. La confrontation entre notre modèle et ces résultats expérimentaux est reportée sur les figures V.14 à V.16.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

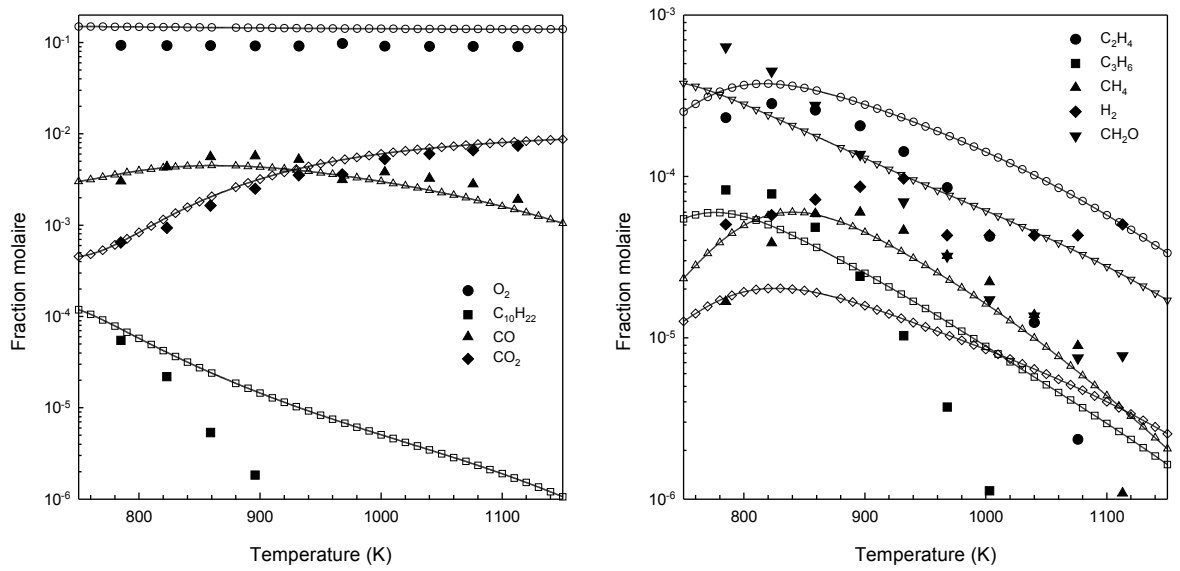


Figure V.14: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du n-décane en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de $C_{10}H_{22}$ et 155000 ppm de O_2 ; φ=0,10 et τ=500 ms) (Voisin, [30])

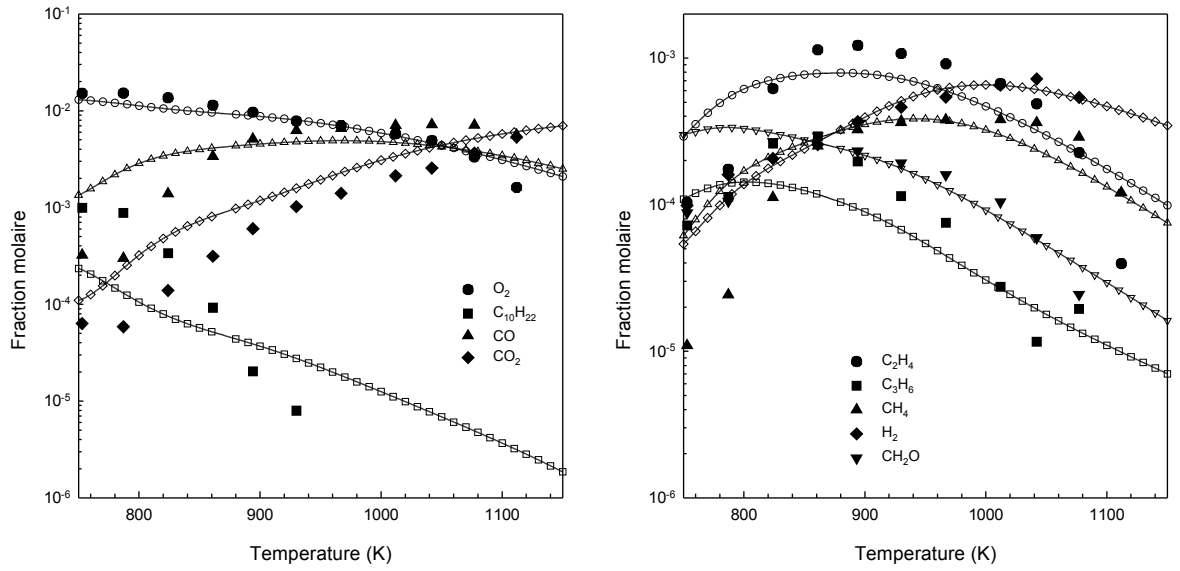


Figure V.15: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du n-décane en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de $C_{10}H_{22}$ et 15500 ppm de O_2 ; φ=1,00 et τ=500 ms) (Voisin, [30])

On peut observer qu'en milieu stœchiométrique et riche, le modèle se montre trop réactif aux plus basses températures, entraînant une surconsommation du réactif initial et une surproduction des principaux intermédiaires. Par ailleurs on remarque également que les mêmes problèmes que précédemment apparaissent: les différents alcènes ne sont pas consommés assez rapidement.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Cependant, l'accord global entre le modèle et l'expérience reste acceptable, et tend à valider le modèle dans ces conditions opératoires.

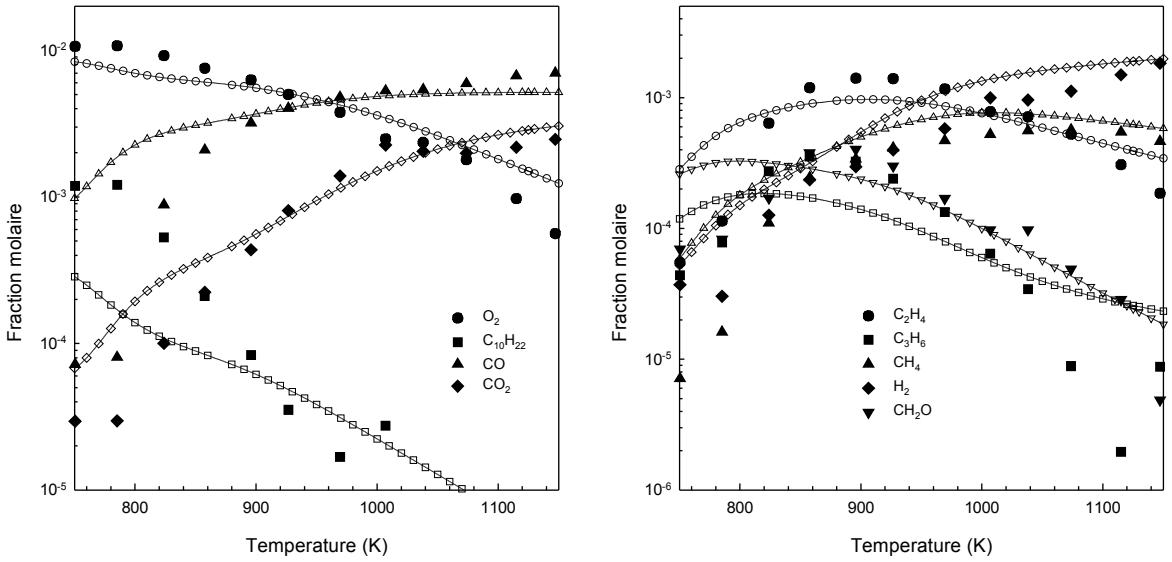


Figure V.16: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du n-décane en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de $C_{10}H_{22}$ et 10330 ppm de O_2 ; φ=1,50 et τ=500 ms) (Voisin, [30])

2.4 Modélisation en réacteur à écoulement

Zeppieri *et al* [28] ont étudié la pyrolyse et l'oxydation du décane à haute température en réacteur à écoulement piston. Nous avons cherché à modéliser ces expériences à l'aide de notre mécanisme. Les résultats sont présentés sur les figures V.17 (pyrolyse) et V.18 (oxydation, φ=1,0).

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

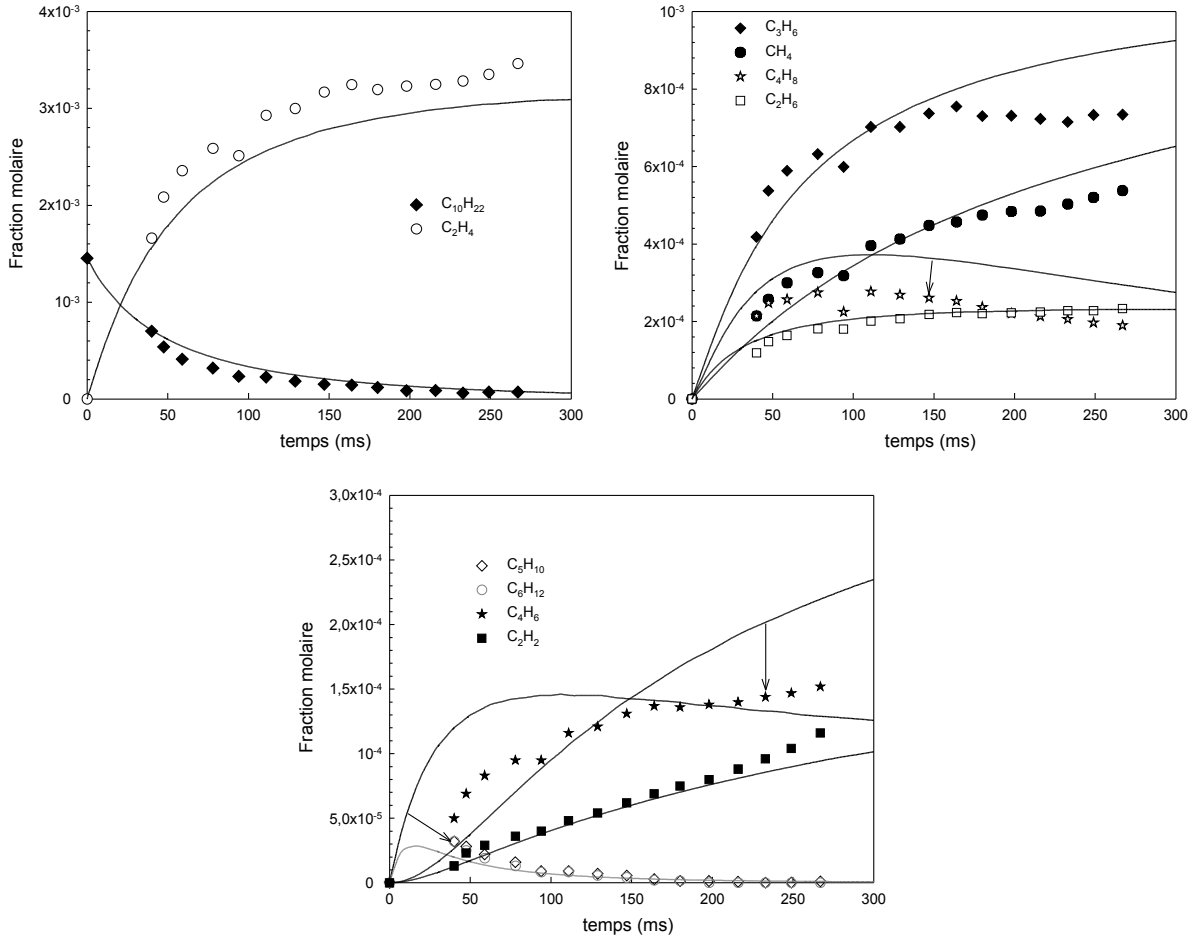


Figure V.17: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): pyrolyse du n-décane en réacteur à écoulement à 1 atm et T=1060 K (1456ppm de $C_{10}H_{22}$) (les points expérimentaux ont été décalés de +33 ms) (Zeppieri *et al*, [28])

Concernant la modélisation des résultats de pyrolyse, on voit que le modèle reproduit de manière très satisfaisante les résultats expérimentaux, mis à part le profil de pent-1-ène. En présence d'oxygène, le modèle montre plus de difficultés à simuler les données expérimentales: si les profils des réactifs et principaux produits intermédiaires sont correctement simulés, ceux du but-1-ène, du pent-1-ène et de l'éthane sont surestimés.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

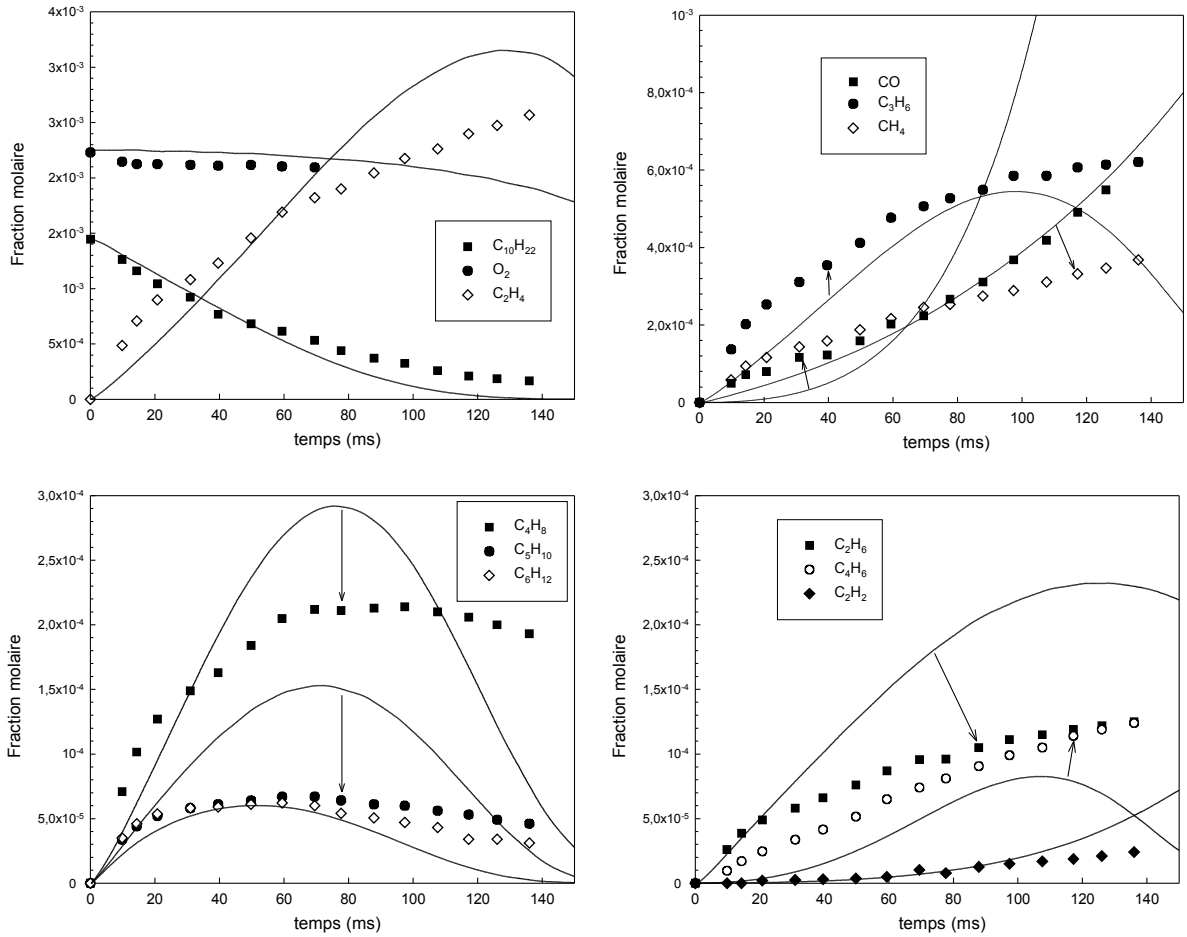


Figure V.18: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du n-décane en réacteur à écoulement à 1 atm et T=1019 K (1456ppm de $C_{10}H_{22}$ et φ=1,0) (les points expérimentaux ont été décalés de +6 ms) (Zeppieri *et al*, [28])

2.5 *Simulations en tube à choc*

Nous avons également tenté de valider notre modèle sur certains résultats de la littérature obtenus en tube à choc. Ainsi sont présentés sur la figure V.19 les prédictions du modèle dans les conditions d'étude de Olchanski et Burcat [31]. Sur ces graphes, β représente les délais d'auto-inflammation normalisés par rapport à la composition initiale du mélange selon une expression déterminée à partir des résultats expérimentaux. On peut voir que l'accord entre le modèle et l'expérience est acceptable même si le mécanisme se montre trop réactif aux plus hautes températures, entraînant une surestimation de l'énergie d'activation (37750 cal.mol^{-1} contre 34240 cal.mol^{-1} expérimentalement).

Les autres simulations menées en tube à choc sont celles relatives aux travaux de Davidson *et al* [32]. Ils ont déterminé les profils temporels du radical OH pour différents mélanges

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

décane/oxygène/argon. Sur la figure V.20 sont présentés les différents résultats: les profils temporels de OH pour différentes températures, l'évolution de la concentration maximale en radicaux OH en fonction de la température et l'évolution des délais d'auto-inflammation (correspondant au temps pour lequel la concentration en radical OH vaut 50% de la valeur maximale). On constate globalement que le modèle surestime à la fois les délais d'auto-inflammation, et la concentration maximale du radical OH. Cependant l'écart entre les simulations et l'expérience semble diminuer avec la température, comme on peut le deviner sur les différents profils temporels de OH. On peut également remarquer que le modèle prévoit une augmentation continue et linéaire de la fraction molaire maximale du radical OH avec la température, alors que l'expérience semble montrer que celle-ci passe par un maximum localisé entre 1650 et 1700 K.

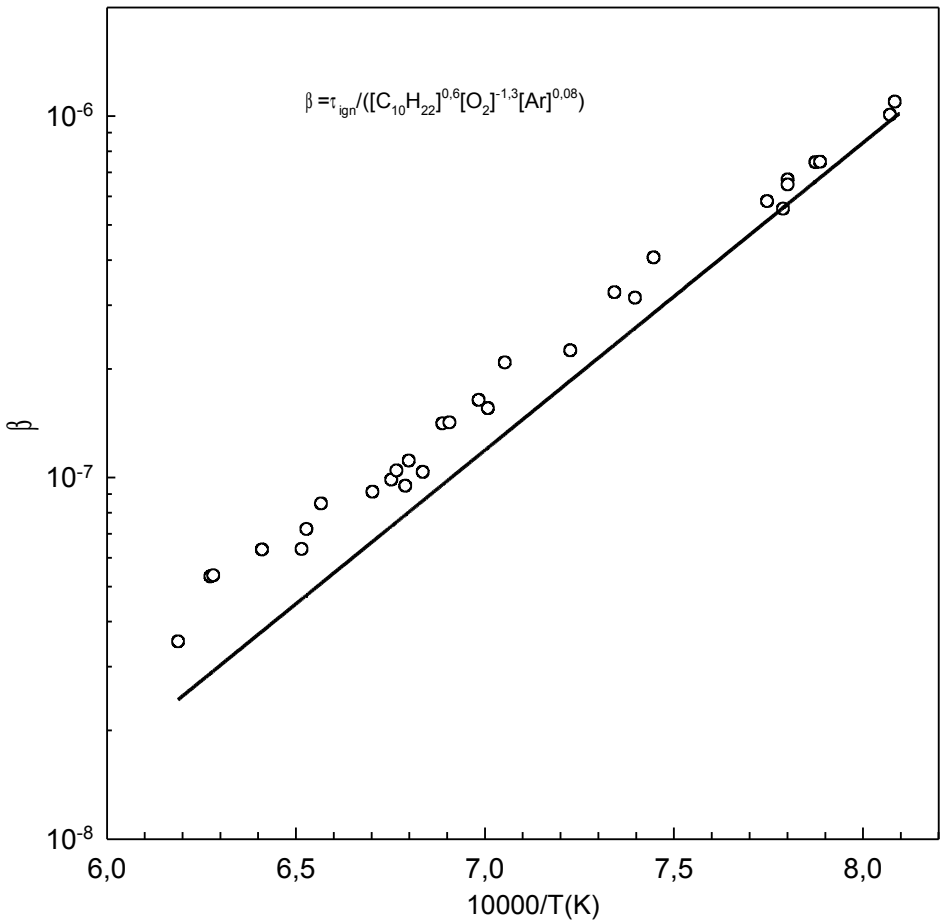


Figure V.19: Délais d'auto-inflammation de mélanges décane/O_2/Ar (Olchanski et Burcat [31]) (0,9<φ<3; 1,8<P(atm)<10)) Confrontation modèle (ligne) -expérience (symboles)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

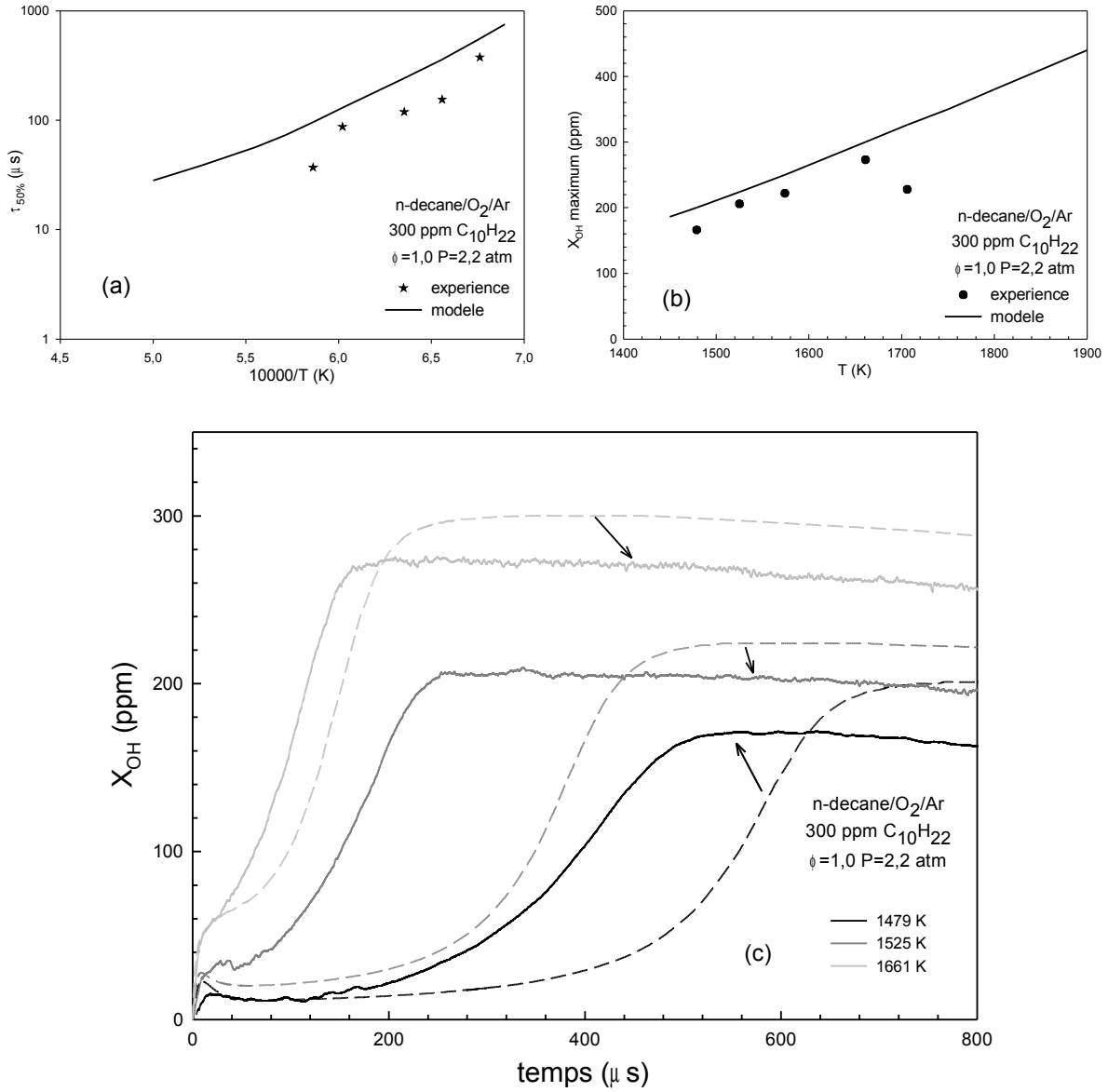


Figure V.20: Oxydation du décane en tube à choc (Davidson *et al* [32])
(a) délais d'auto-inflammation
(b) évolution de $X_{OH\ max}$ avec la température
(c) profils temporels de OH (ligne continue: expérience, ligne discontinue: modèle)

3. Le sous-mécanisme du n-propylcyclohexane

Les seuls modèles d'oxydation du n-propylcyclohexane disponibles dans la littérature proviennent de notre équipe à Orléans [25, 33, 34]. Ces mécanismes décrivent l'oxydation de haute température de cet hydrocarbure: ils ont été validé par modélisation d'expériences menées en réacteur auto-agité. Récemment, Silke *et al* [35], Cavalotti *et al* [36] et Pitz *et al* [37] ont proposé des mécanismes d'oxydation de basse température du cyclohexane et du méthylcyclohexane validés pour des délais d'auto-inflammation en MCR.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Dans cette 3ème partie, nous décrirons la démarche utilisée lors du développement du mécanisme d'oxydation du propylcyclohexane. Ce modèle sera ensuite confronté aux résultats expérimentaux disponibles en réacteur auto-agité.

✗ Nomenclature utilisée

Les principes de nomenclature utilisé dans le mécanisme primaire du propylcyclohexane sont les mêmes que dans le sous-mécanisme du décane. La correspondance entre les indices et la position des atomes de carbone et des liaisons est indiquée sur la figure V.21. Les propriétés thermodynamiques des espèces introduites ont été estimées au moyen du logiciel Therm [38].

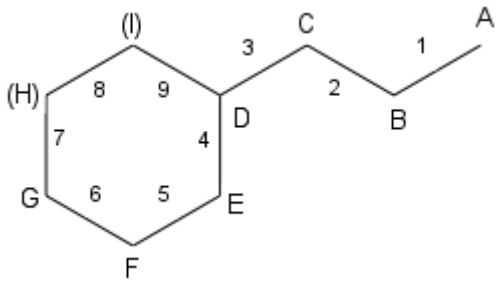


Figure V.21: Nomenclature utilisée dans le modèle pour les dérivés du propylcyclohexane

Ainsi le 3-allylcyclohexylhydroperoxyde est noté pche1qF, le 4-propylcyclohexène pche6, le radical 1-propylcyclohexylperoxy pchqjD et le radical 1-prop-2-ylcyclohexane pchB

3.1 Mécanisme de haute température

Nous avons repris dans cette étude le mécanisme des naphtènes (cyclohexane-propylcyclohexane) proposé par Mati [25]. Ce mécanisme, validé en réacteur auto-agité, contient un sous-mécanisme d'oxydation du propylcyclohexane. Ce sous-mécanisme comporte les réactions d'amorçage bimoléculaires et unimoléculaires par rupture de liaisons C−C de cet hydrocarbure, ainsi que les réactions de métathèse et de décomposition des radicaux propylcyclohexyles.

La structure et les réactions de ce sous-mécanisme n'ont pas été modifiées, mais certaines constantes de vitesse ont néanmoins été réévaluées. C'est le cas des réactions de métathèse avec les radicaux OH, HO_2, CH_3, C_2H_5, C_2H_3 et avec les atomes O et H. Pour les réactions arrachant un atome d'hydrogène sur la chaîne latérale, les constantes de vitesse ont été estimées par analogie avec les réactions équivalentes du propane. Dans les autres cas (atome d'hydrogène arraché sur le

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

cycle), nous avons utilisé les valeurs suggérées par Orme *et al* [39] lors de leur étude de l'oxydation du méthylcyclohexane. Certaines de ces constantes de vitesse sont indiquées dans le tableau V.9.

Pour compléter ce sous-mécanisme, nous y avons ajouté les voies de formation des propylcyclohexènes et des propénylcyclohexènes à partir des radicaux propylcyclohexyles: réactions d'oxydation ou perte d'un atome d'hydrogène par décomposition C−H. Dans ce dernier cas, les paramètres cinétiques ont été estimées selon les recommandations de Dean [40].

R	OH			HO_2			CH_3			H		
	log A	n	E	log A	n	E	log A	n	E	log A	n	E
pchA	7,5	1,8	934	4,4	2,55	16494	12,2	0	11710	5,8	2,54	6756
pchB, pchC	9,5	1	260	4	2,6	13910	11,9	0	10110	6,11	2,4	4471
pchD	12,7	0	790	3,5	2,5	10532	-9,2	6,4	893	5,8	2,4	2583
pchE, pchF	13	0	790	4,3	2,6	13910	0,5	3,5	5481	6,4	2,4	4471
pchG	12,7	0	790	4	2,6	13910	0,2	3,5	5481	6,1	2,4	4471

Tableau V.9: Constantes de vitesse des réactions de métathèse
pch + R ⇆ pchX + RH utilisées (unités: A en $cm^3.mol^{-1}.s^{-1}$ et E en $cal.mol^{-1}$)

3.2 Mécanisme de basse température

a) schéma cinétique

Les voies d'oxydation de basse température des naphtènes obéissent aux mêmes règles que celles des alcanes. La première consiste en une addition de l'oxygène sur le radical alkyle puis en une isomérisation en radical hydroperoxyalkyle. Ce radical peut alors former un hétérocyle oxygéné ou additionner à son tour l'oxygène. L'isomérisation de ces radicaux O_2QO_2H, suivie d'une décomposition, permet de rompre la structure initiale du réactif et de produire des composés carbonylés.

Dans le cas des naphtènes et spécialement du n-propylcyclohexane ces réactions aboutissent à la perte de la structure cyclique et forment des espèces linéaires ramifiées. Ces espèces insaturées portent des fonctions carbonyles et de nombreux isomères se forment. La décomposition de ces différentes espèces a été envisagée dans ce modèle par des ruptures de liaisons C−C et des

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

mécanismes d'addition d'oxygène-isomérisation-décomposition, générant des molécules et radicaux de structure plus simple et généralement non ramifiés.

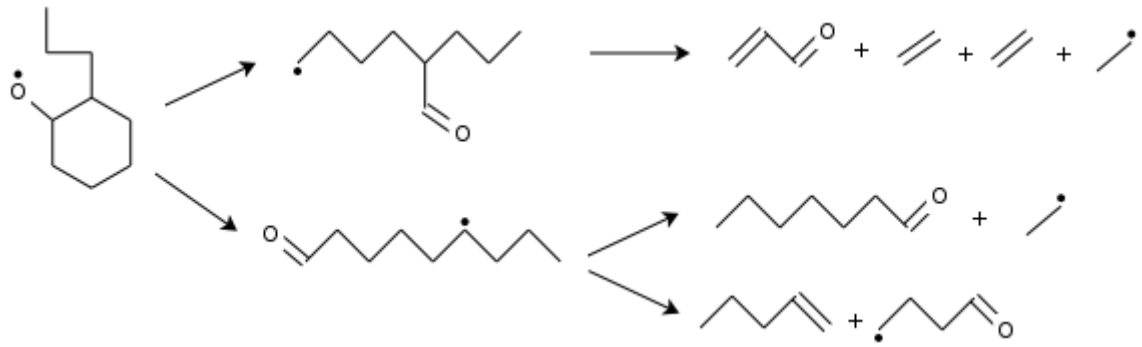


Figure V.22: Exemple de décomposition menant à la perte de la structure cyclique initiale

Nous avons également repris dans notre mécanisme les hypothèses de Silke *et al* [35] pour l'isomérisation des radicaux O_2QO_2H. Traditionnellement l'atome d'hydrogène qui est arraché durant ces réactions d'isomérisation est celui porté par l'atome de carbone lié au groupement hydroperoxy, menant ainsi après la rupture de la liaison O-OH initiale à un cétohydroperoxyde. Cependant Silke *et al* ont postulé que dans le cas des composés cycliques, l'atome d'hydrogène arraché durant la réaction pouvait être porté par un atome de carbone autre que celui considéré précédemment. Cette voie d'isomérisation qualifiée de non conventionnelle est justifiée par le fait qu'elle peut avoir lieu à des vitesses plus élevées que la voie conventionnelle (suite aux contraintes imposées par le cycle). Un exemple de ces voies d'isomérisation non conventionnelles est présenté sur la figure V.23.

b) paramètres cinétiques

Nous allons expliciter dans cette partie les méthodes d'estimation des constantes cinétiques utilisées. Ces méthodes concernent les réactions d'isomérisation des radicaux peroxypropylcyclohexyles, de formation des éthers bicycliques et d'ouverture du cycle. Pour ces réactions, les paramètres utilisés dans les cas des hydrocarbures linéaires ne sont pas applicables. Dans les autres cas, les constantes utilisées dans le mécanisme d'oxydation du décane ont également été utilisées dans celui du propylcyclohexane.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

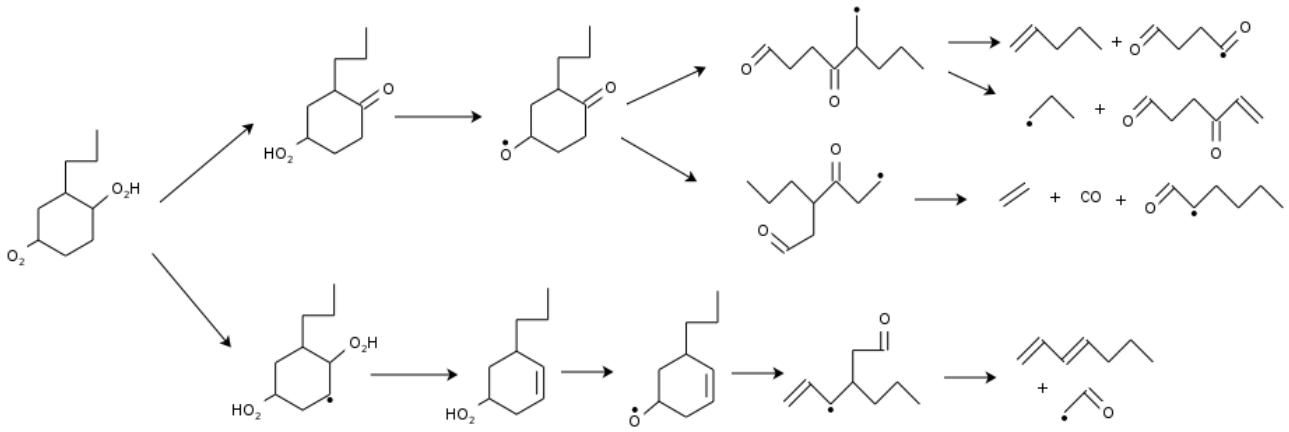


Figure V.23: Exemples de réactions d'isomérisation conventionnelle et non conventionnelle lors de la décomposition des radicaux O_2QO_2H du propylcyclohexane

- réactions d'isomérisation de RO_2 et O_2QO_2H

Les réactions d'isomérisation des radicaux RO_2 et O_2QO_2H issus du propylcyclohexane peuvent être classées en 3 catégories selon les atomes de carbone impliqués durant l'état de transition:

- état de transition n'incluant que les atomes localisés sur la chaîne latérale
- état de transition n'incluant que les atomes de carbone faisant partie du cycle carboné initial
- état de transition impliquant à la fois des constituants de la chaîne latérale et du cycle carboné

Les réactions classées dans la première catégorie correspondent à celles rencontrées lors de l'oxydation du n-décane. Les mêmes méthodes d'estimation ont été appliquées (tableau V.6).

Pour les réactions de la 2ème catégorie, nous avons utilisé la même démarche que Silke *et al* [35]. Handford-Styring et Walker [41] ont déterminé expérimentalement les constantes de vitesse des réactions d'isomérisation des radicaux cyclohexylperoxy. De leur côté Walker et Morley [42] ont déterminé les mêmes paramètres pour l'isomérisation des radicaux peroxyalkyles. A partir de ces résultats, Silke *et al* ont estimé les perturbations dues à la présence du cycle. Le facteur de fréquence calculé dans le cas où le radical serait linéaire est corrigé au moyen d'un facteur multiplicatif. Ce facteur correctif dépend de la taille de l'état de transition (nombre d'atomes de carbone impliqués). L'énergie d'activation est incrémentée d'une énergie d'activation

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

supplémentaire, fonction également de l'état de transition, traduisant la tension de cycle induite par le cycle initial. Ces corrections sont indiquées dans le tableau V.10.

Ainsi, concrètement, les constantes de vitesse sont estimées de la manière suivante:

- les paramètres cinétiques (facteur préexponentiel et énergie d'activation) sont calculés comme si le radical était linéaire
- ces paramètres sont ensuite corrigés, selon la taille de l'état de transition impliqué, par les facteurs correctifs précédemment déterminés

Quelques exemples sont donnés à titres d'illustration dans le tableau V.7.

Taille de l'état de transition	A (s^{-1})	n	E_a ($cal.mol^{-1}$)
	Radicaux peroxycyclohexyles: Handford-Styring et Walker [41]		
5	$8,71.10^{11}$	0	32433
6	$6,46.10^{11}$	0	29517
7	$7,5910^{10}$	0	26816
	Radicaux peroxyalkyles: Walker et Morley [42]		
5	$1,41.10^{12}$	0	31788
6	$1,74.10^{11}$	0	26291
7	$2,19.10^{10}$	0	21510,5
Facteurs correctifs	A_{cyclo}/A_{lin}		$E_{a,cyclo}$-$E_{a,lin}$
TS5	0,62		645
TS6	3,72		3226
TS7	3,47		5305,5

Tableau V.10: Estimation des facteurs correctifs pour les réactions d'isomérisation

Pour les réactions entrant dans la 3ème catégorie, nous avons adopté une démarche identique à celle du deuxième cas. Dans un premier temps la molécule est considérée comme linéaire et la constante de vitesse correspondante est déterminée. Cette valeur est ensuite corrigée:

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

- si l'état de transition n'implique que 2 atomes de carbone du cycle, la correction correspondant au cas TS5 est appliquée (ex: pchqjC=EpchqC 1-cyclohexyl-prop-1-ylperoxy ⇆ 2-(1-hydroperoxypropyl)-cyclohex-1-yle)
- si l'état de transition implique 3 atomes du cycle, on applique la correction TS6(ex: pchqjF=BpchqF 3-propylcyclohexylperoxy ⇆ 3-(prop-2-yle)-cyclohexyl-hydroperoxyde))
- si 4 atomes de carbone du cycle sont impliqués dans l'état de transition, la correction TS7 est utilisée (ex: pchqjC=GpchqC 1-cyclohexyl-prop-1-ylperoxy ⇆ 4-(1-hydroperoxypropyl)-cyclohex-1-yle)

Réaction	**TS**	$k_{linéaire}$			$k_{corrigée}$		
		A (s^{-1})	n	E_a ($cal.mol^{-1}$)	A (s^{-1})	n	E_a ($cal.mol^{-1}$)
pchqjD⇆EpchqD	5	$6,69.10^9$	1	32500	$4,15.10^9$	1	33145
pchqjF⇆IpchqF	7	$9,89.10^7$	1	22000	$3,43.10^8$	1	27306
pchqEqjG⇆pchoEqG+oh	6	$2,87.10^8$	1	23000	$1,07.10^9$	1	26226
pchqGqjF⇆pchoGqF+oh	5	$1,67.10^9$	1	30500	$1,04.10^9$	1	31145

Tableau V.11: Exemples de constantes de vitesse de réactions d'isomérisation estimées par la méthode proposée par Silke *et al* [35]

- formation des éthers cycliques

Les réactions de formation des éthers cycliques se répartissent comme les réactions d'isomérisation en 3 catégories: hétérocycles sur la chaîne latérale, hétérocycles entre atomes du cycle initial et hétérocycles entre le cycle carboné et la chaîne latérale.

Taille de l'hétérocycle oxygéné	**A (s^{-1})**	**n**	**E_a ($cal.mol^{-1}$)**
3	$5,8.10^{12}$	0	13400
4	$1,4.10^{12}$	0	20000
5	$8,6.10^{12}$	0	18500

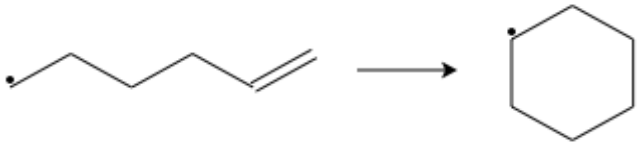
© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Tableau V.12: Constantes de vitesse utilisées pour la formation des hétérocycles oxygénés (Silke *et al* [35])

Concernant la 1ère catégorie, les constantes de vitesse utilisées sont les mêmes que pour l'oxydation du n-décane (tableau V.7). Les hétérocycles du 2ème groupe correspondent à ceux rencontrés lors de l'oxydation du cyclohexane, et pour cette raison nous avons utilisé les constantes de vitesse proposées par Silke *et al* [35] (tableau V.12). Quant à la dernière catégorie, nous avons en première approximation considéré les constantes de vitesse de formation des monocycles, qui sont moins élevées que celles formant les bicycles de la 2ème catégorie.

- ouverture du cycle

Nous avons vu au paragraphe précédent que bien souvent la structure cyclique initiale est rompue. Matheu *et al* [43] ont étudié la formation et l'ouverture des différents cycles carbonés. Ils ont déterminé les limites haute pression des constantes de vitesse associées à ces réactions. Ils proposent ainsi pour la réaction de formation du radical cyclohexyle à partir du radical hex-1-èn-6-yle la constante de vitesse suivante: $k\ (s^{-1})=1{,}0.10^{8}.T^{0{,}86}.\exp(-5900/RT)$



Dans notre modèle, cette constante de vitesse a été utilisée systématiquement lors de toutes les réactions conduisant à l'ouverture du cycle. Ces réactions ont alors été écrites dans le sens de la cyclisation du radical formé.

3.3 Confrontation modèle-expérience en réacteur auto-agité

a) Oxydation du cyclohexane

Avant de présenter les comparaisons entre expérience et simulation de l'oxydation du n-propylcyclohexane, nous avons testé notre modèle pour l'oxydation du cyclohexane en réacteur auto-agité [44]. Nous présentons sur la figure V.24 les résultats obtenus à la stœchiométrie et 10 atm.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

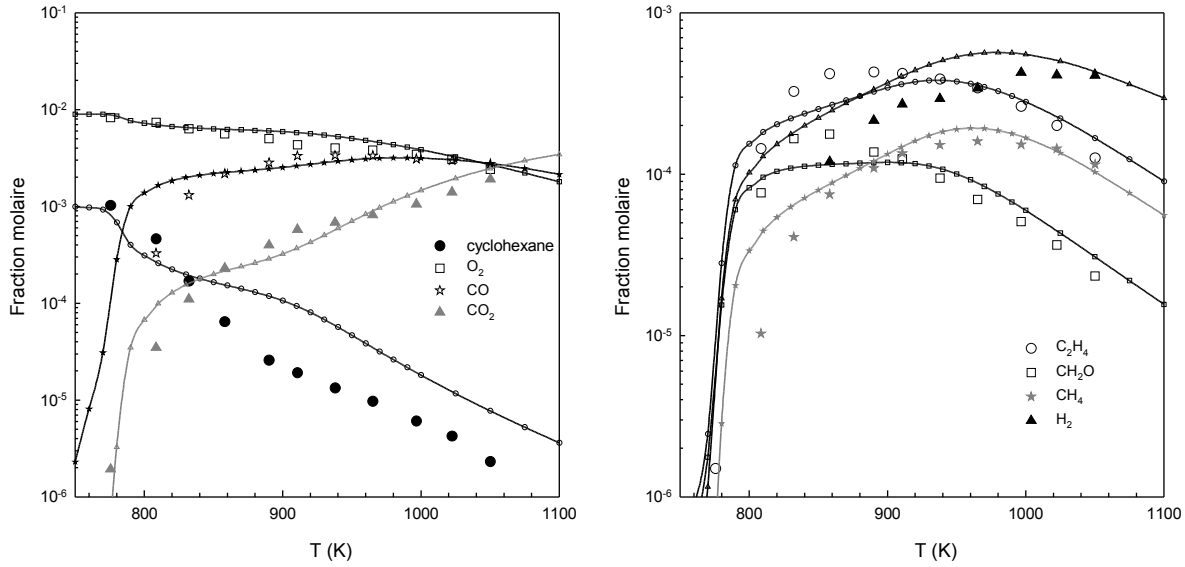


Figure V.24: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du cyclohexane en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de C_6H_{12} et 9000 ppm de O_2 ; φ=1,00 et τ=500 ms) (Voisin *et al* [44])

On remarque que le modèle reproduit de manière assez satisfaisante les données expérimentales. Cependant le cyclohexane est consommé trop rapidement aux plus basses températures alors que sa concentration est surestimée aux plus hautes températures. Cette consommation trop rapide du réactif avant 850 K se répercute sur les profils des principaux produits et espèces intermédiaires, et notamment CO et CH_4.

b) *Oxydation du n-propylcyclohexane*

Le modèle développé dans cette étude a été utilisé pour modéliser l'oxydation du n-propylcyclohexane en réacteur auto-agité. Sur la figure V.25 est présentée la confrontation entre les prévisions du modèle et les résultats obtenus durant ce travail à φ=0,25. Les comparaisons entre notre modèle et les résultats obtenus par Mati [25] sont représentés sur les figures V.26 à V.29.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

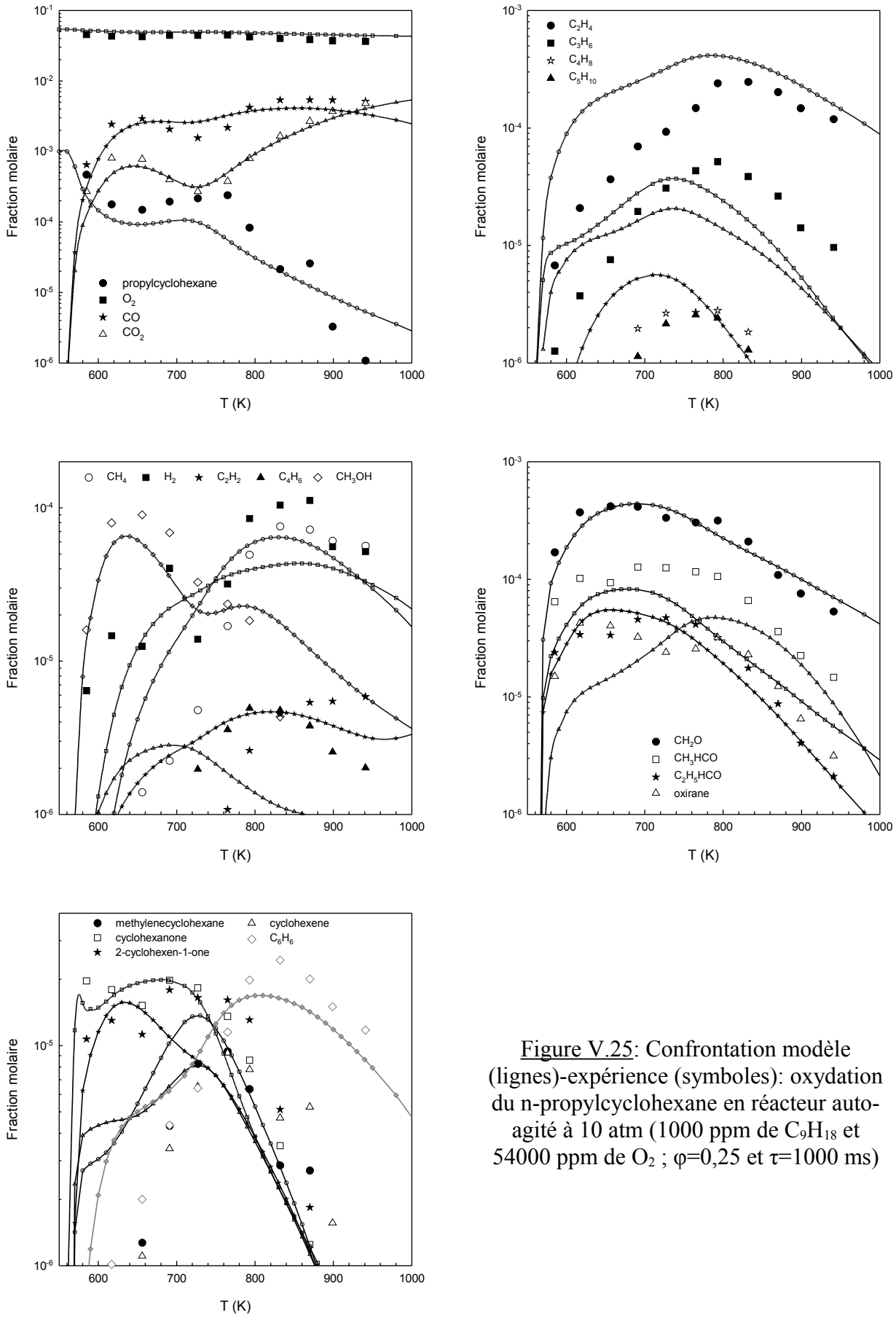


Figure V.25: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du n-propylcyclohexane en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de C_9H_{18} et 54000 ppm de O_2 ; φ=0,25 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

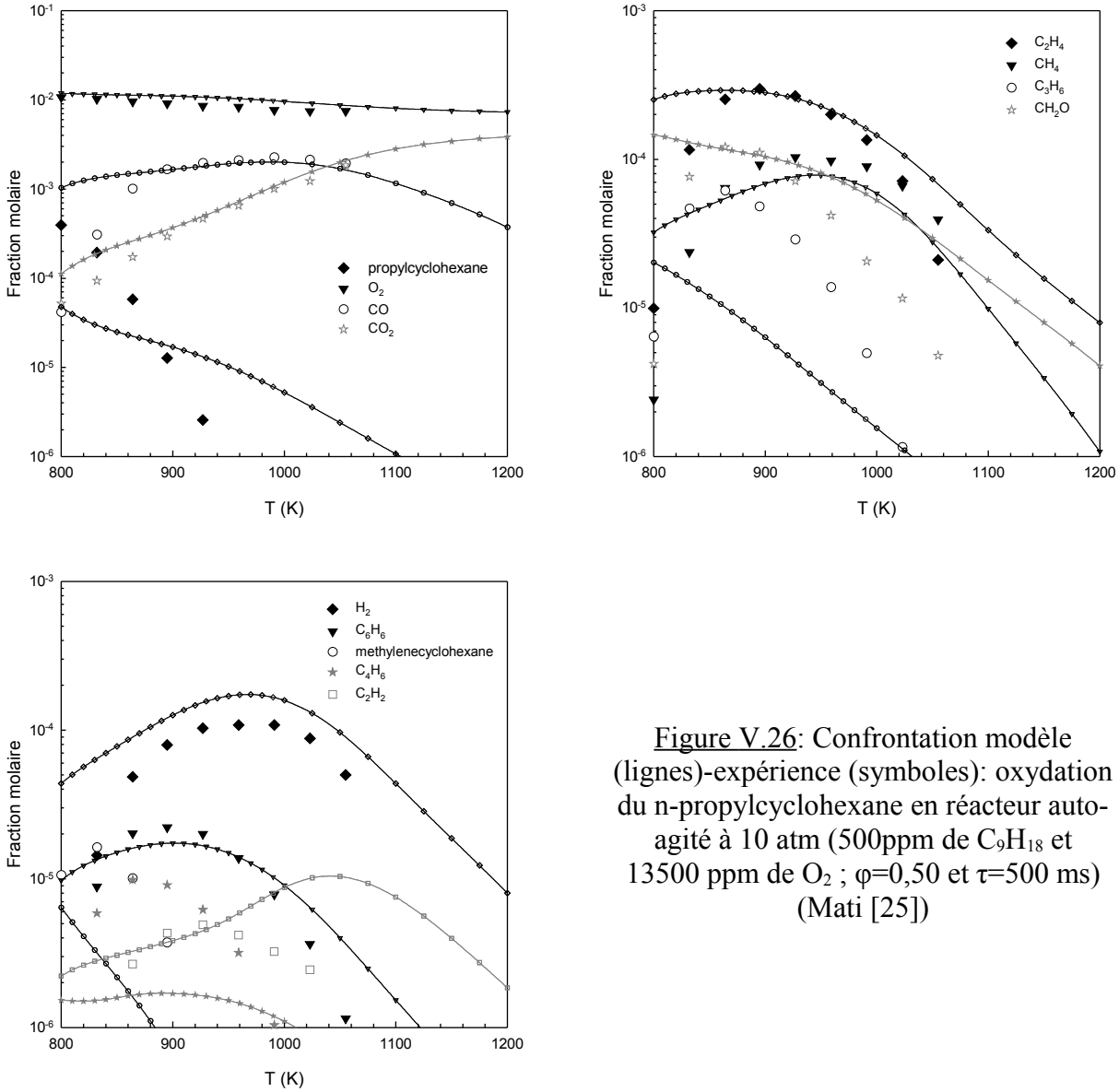


Figure V.26: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du n-propylcyclohexane en réacteur auto-agité à 10 atm (500ppm de C_9H_{18} et 13500 ppm de O_2 ; φ=0,50 et τ=500 ms) (Mati [25])

Dans nos conditions, nous pouvons nous apercevoir que le modèle prévoit une consommation trop importante du propylcyclohexane à basse température. De la même manière, le coefficient négatif de température prédit par le modèle n'est pas aussi intense que celui observé expérimentalement, entraînant une surestimation de CO dans cette plage de température. A basse température, nous pouvons également constater que le modèle présente un défaut que nous avions rencontré initialement avec le modèle du décane, à savoir une production trop importante de petites molécules et particulièrement l'éthylène. Ce problème vient des voies de dégradation des éthers cycliques et des cétohydroperoxyalkyles cycliques: seules des décompositions par β-scission ont été écrites, réactions qui mènent à la formation d'alcènes. Les composés carbonylés (CH_2O, CH_3HCO,

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

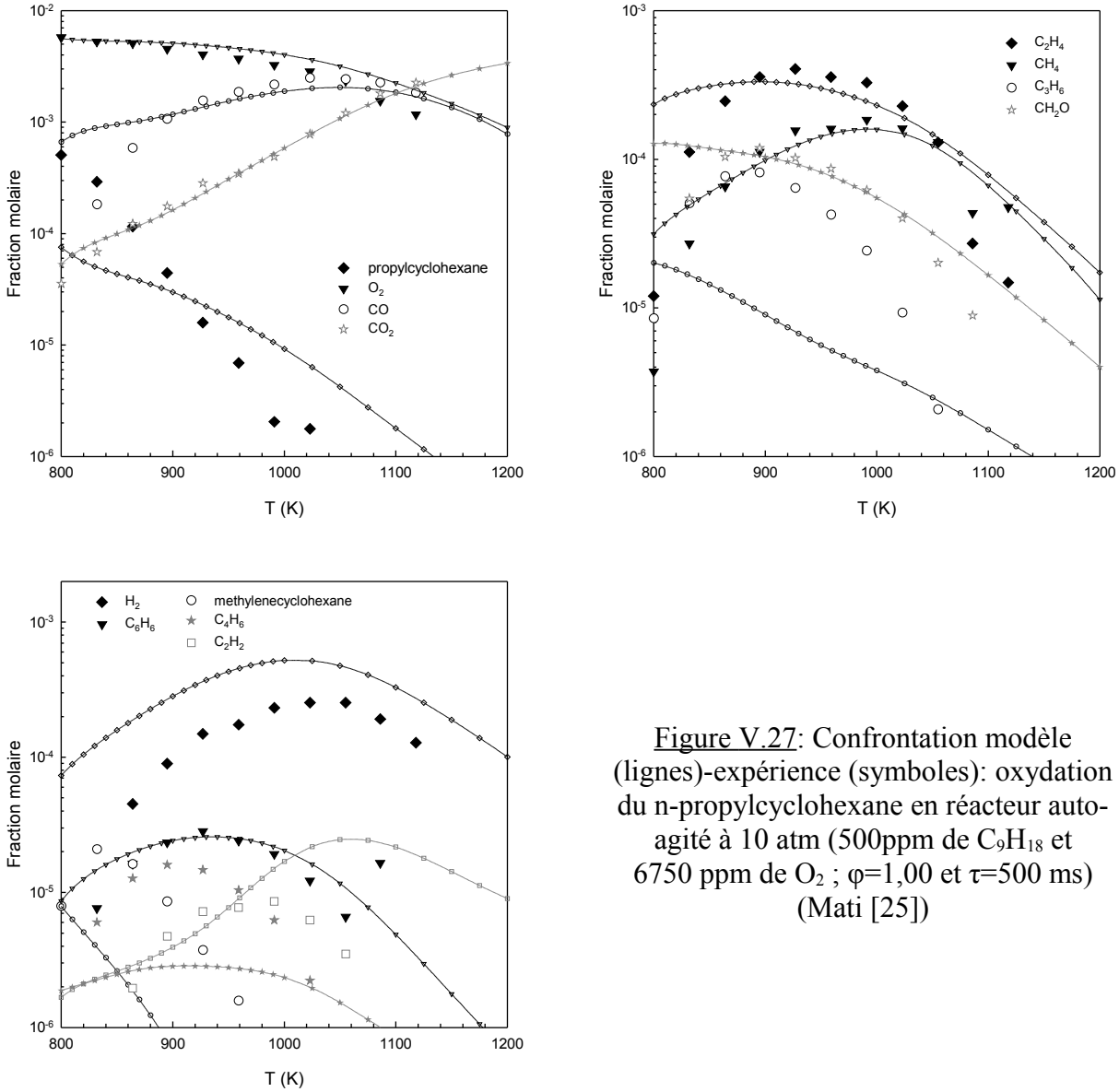


Figure V.27: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du n-propylcyclohexane en réacteur auto-agité à 10 atm (500ppm de C_9H_{18} et 6750 ppm de O_2 ; φ=1,00 et τ=500 ms) (Mati [25])

C_2H_5HCO) sont convenablement reproduits par le modèle alors que l'oxirane est sous-estimé à basse température. De manière similaire, les profils des composés cycliques principaux sont également bien simulés même si le benzène et le cyclohexène sont produits trop abondamment à basse température.

Si l'on considère maintenant les simulations qui correspondent aux résultats obtenus par Mati, on remarque que quelle que soit la richesse, le modèle surestime la réactivité entre 800 et 900 K. Ceci est visible par la sous-estimation de la concentration du propylcyclohexane et la surestimation de celles des principaux intermédiaires dans cette plage de température. Au-delà de 900 K, il existe

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

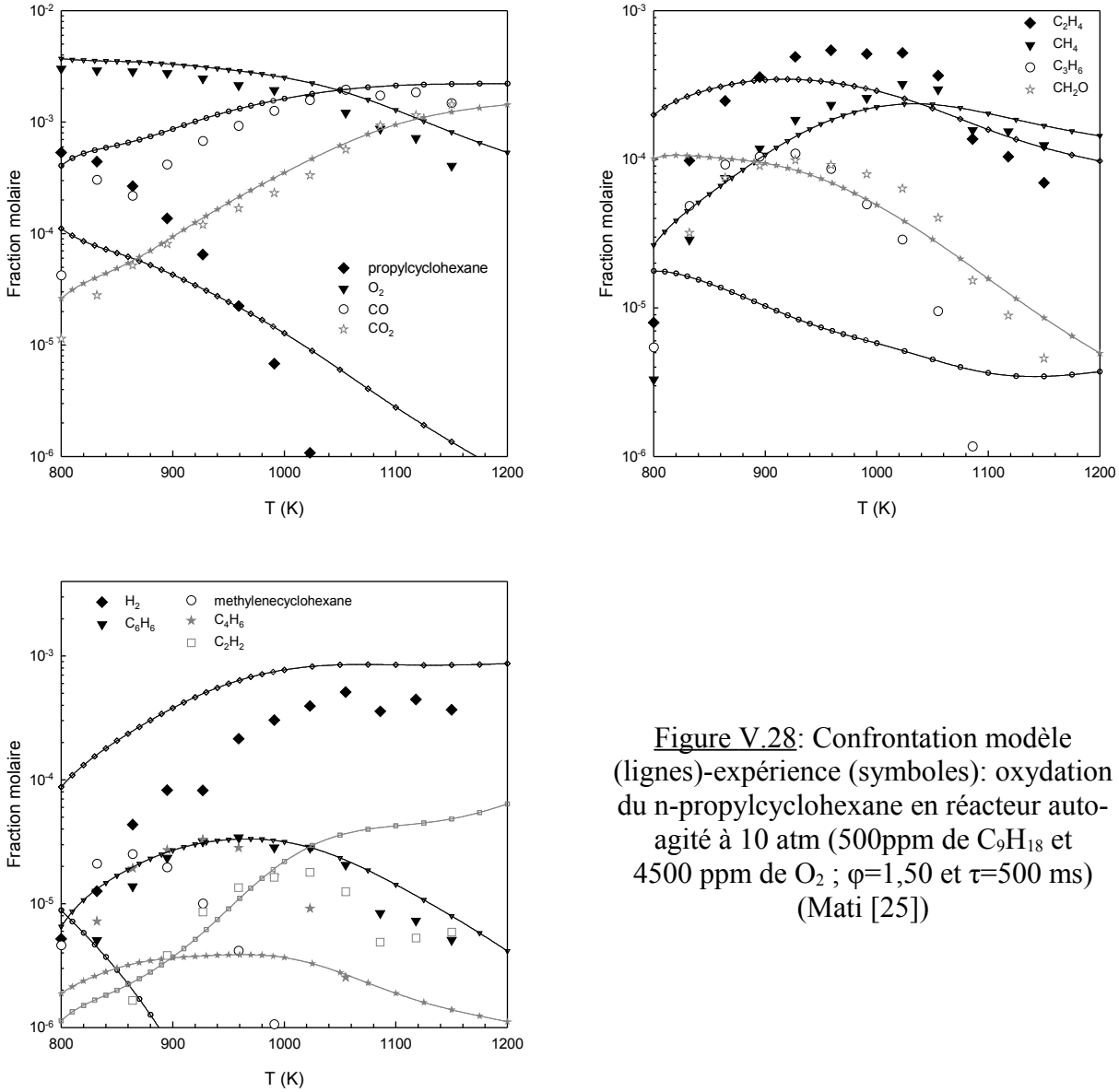


Figure V.28: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du n-propylcyclohexane en réacteur auto-agité à 10 atm (500ppm de C_9H_{18} et 4500 ppm de O_2 ; φ=1,50 et τ=500 ms) (Mati [25])

un très bon accord entre les profils simulés et expérimentaux pour les produits et intermédiaires principaux. Toutefois on observe une surestimation chronique de l'hydrogène, ainsi qu'une sous-estimation du propène et du buta-1,3-diène. On constate également que le profil de méthylènecyclohexane simulé est décalé vers les basses températures.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

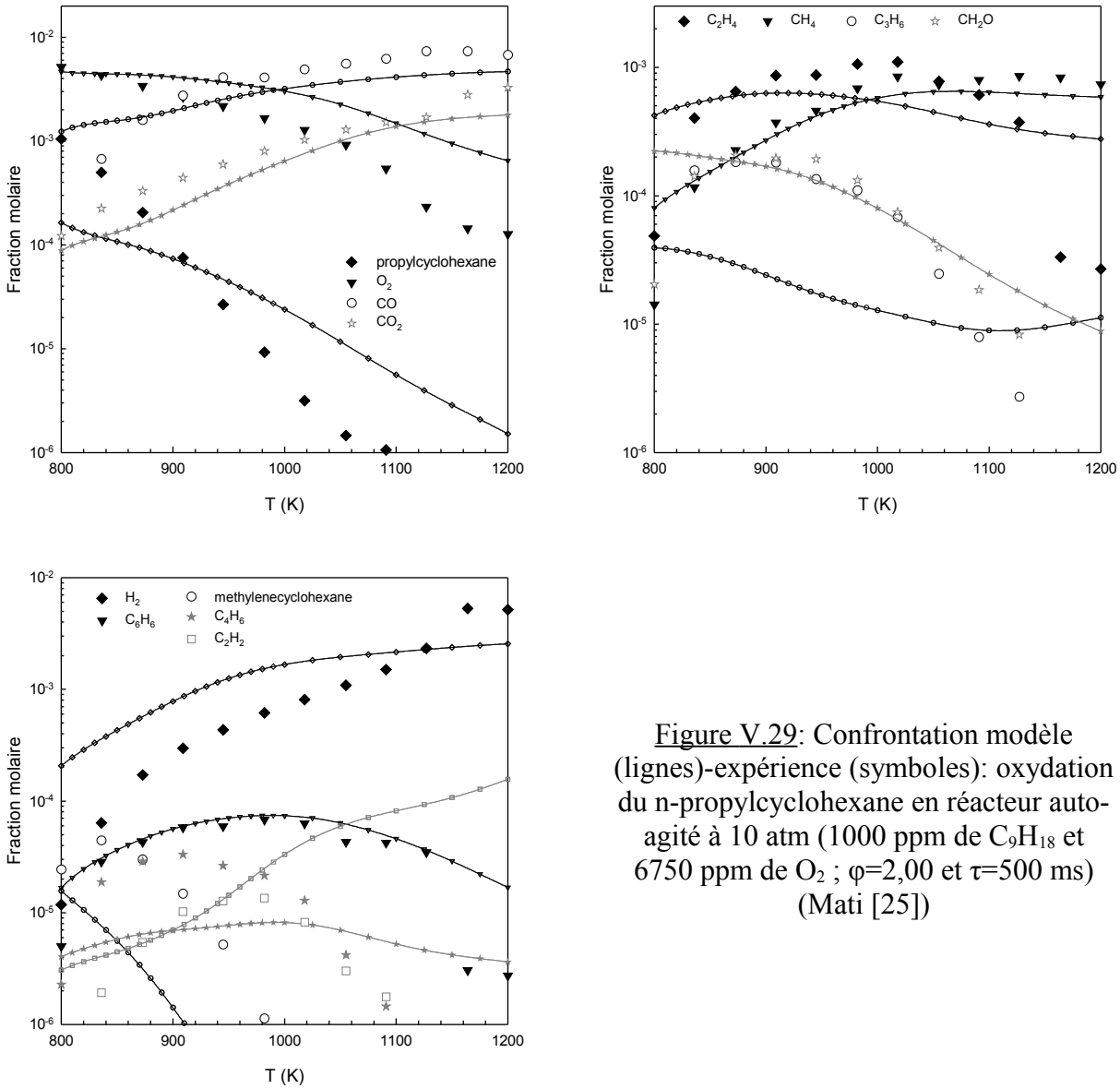


Figure V.29: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du n-propylcyclohexane en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de C_9H_{18} et 6750 ppm de O_2 ; φ=2,00 et τ=500 ms) (Mati [25])

c) *Analyse de voies réactionnelles*

Nous avons effectué une analyse de vitesse en milieu pauvre (φ=0,25) et à haute pression (10 atm) afin de délimiter les chemins réactionnels majoritaires lors de l'oxydation du propylcyclohexane.

- A 650 K le propylcyclohexane et les espèces dérivées réagissent selon le chemin réactionnel représenté sur la figure V.28

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

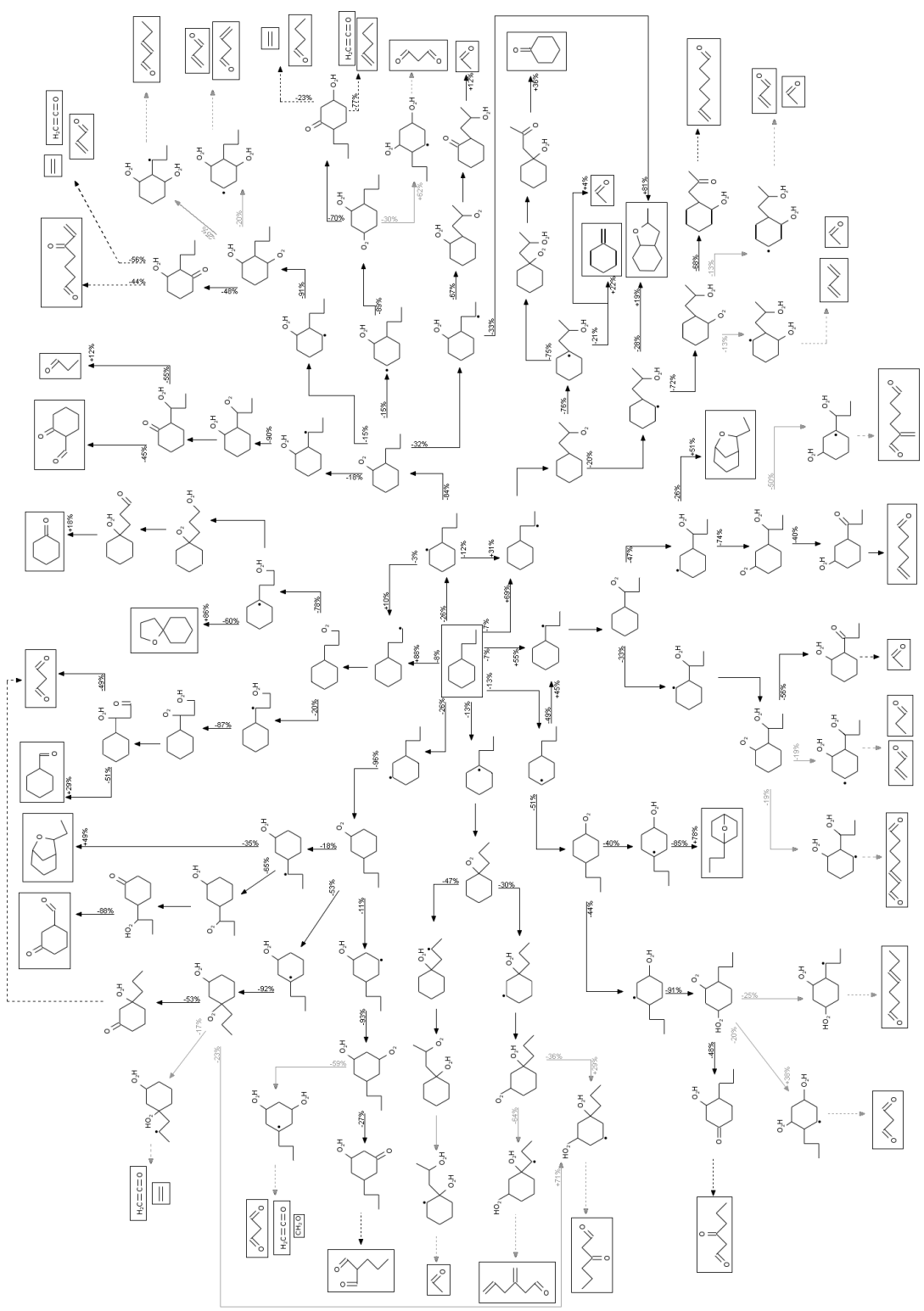


Figure V.30: Voies de dégradation principales du n-propylcyclohexane lors de l'oxydation d'un mélange n-propylcyclohexane/ oxygène/azote (P=10 atm, φ=0,25) en réacteur auto-agité à T=650 K
(les composés moléculaires sont encadrés, les flèches grises représentent les réactions d'isomérisation alternatives)

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

A cette température, le propylcyclohexane réagit quasi-totalement par des réactions de métathèse avec le radical OH pour former les différents radicaux propylcyclohexyles. Ces radicaux vont alors majoritairement (>80%) fixer l'oxygène pour former des radicaux propylcyclohexylperoxy. Les réactions d'isomérisation et d'oxydation représentent les autres possibilités réactionnelles de ces radicaux, mais sont des voies minoritaires. On peut cependant noter que le comportement particulier du radical 4-propylcyclohexyle qui ne fixe qu'à hauteur de 50% l'oxygène, les réactions d'isomérisation étant majoritaires.

Les radicaux propylcyclohexylperoxy RO_2 réagissent ensuite majoritairement par des réactions d'isomérisation pour former des radicaux propylcyclohexylhydroperoxy QO_2H. Ces nouveaux radicaux se fixent ensuite principalement sur l'oxygène moléculaire (formation de O_2QO_2H) et les réactions de formation des éthers cycliques ou bicycliques ne sont pas les processus dominants.

Les espèces O_2QO_2H subissent à leur tour une étape d'isomérisation pour former des cétohydroperoxydes (voie conventionnelle) ou des radicaux dihydroperoxyliques (voie non conventionnelle). On peut noter que l'importance de la voie non conventionnelle varie selon le radical considéré mais peut être la voie majoritaire voire la voie unique (pchqDqjF). Ces radicaux dihydroperoxyliques se décomposent ensuite selon plusieurs voies selon les positions relatives des groupements hydroperoxy et du site radicalaire. Les cétohydroperoxydes réagissent ensuite par rupture de la liaison O-O puis décomposition en aldéhyde et radical alkyle (ou un radical ramifié oxoalkyle)

- Le schéma de dégradation du propylcyclohexane à 850 K est présenté sur la figure V.27.

Dans ces conditions, le propylcyclohexane réagit toujours par métathèse avec le radical OH pour former les radicaux propylcyclohexyles. A cette température, la réaction d'addition sur l'oxygène ne représente que 50% en moyenne des voies de consommation de ces radicaux. Les autres voies sont constituées des réactions d'isomérisation, qui redistribuent les différents isomères, et des réactions d'oxydation qui aboutissent à la formation des propénylcyclohexanes et des propylcyclohexènes.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

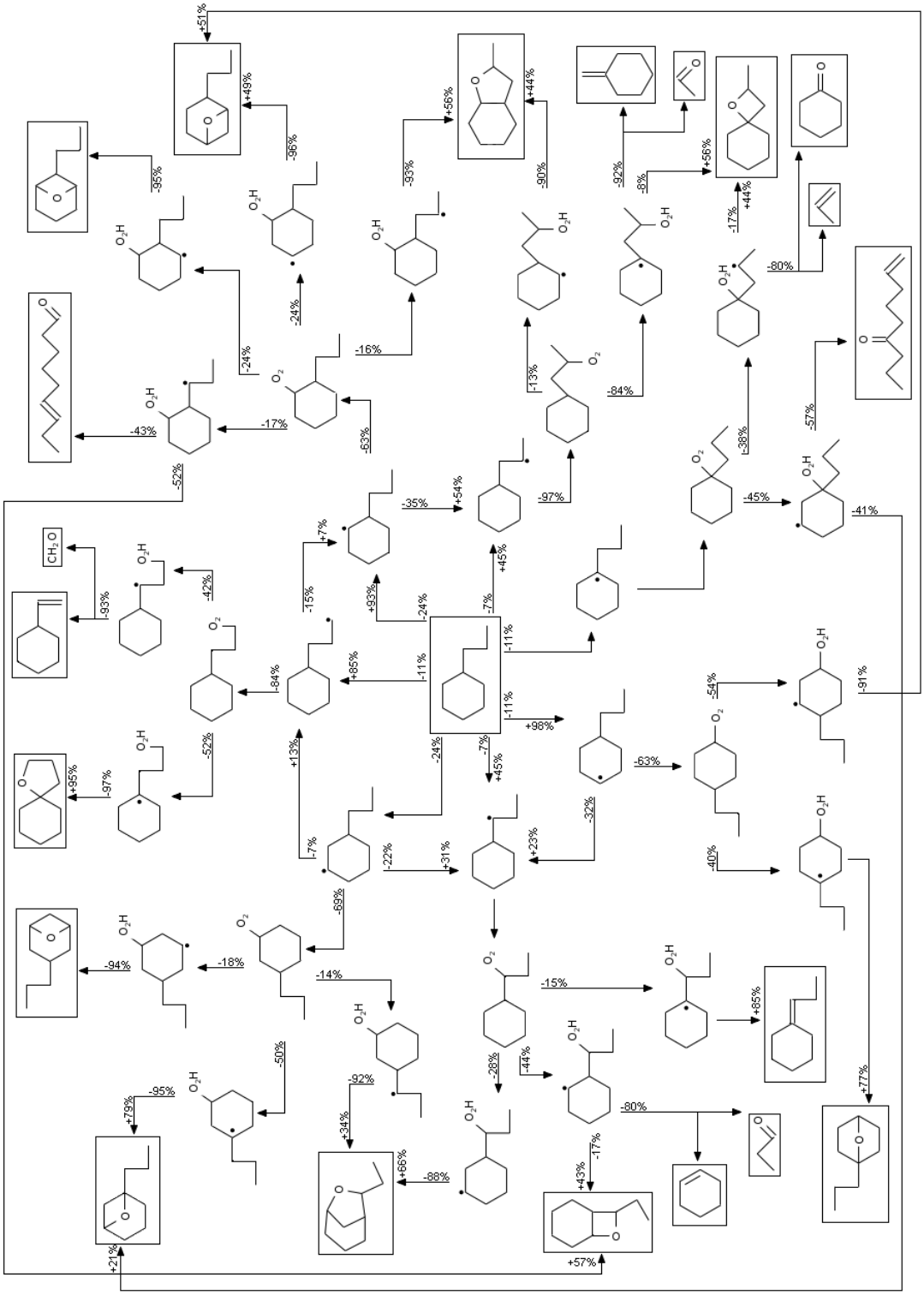


Figure V.31: Voies de dégradation principales du n-propylcyclohexane lors de l'oxydation d'un mélange décane/oxygène/azote (P=10 atm, φ=0,25) en réacteur auto-agité à T=850 K (les composés moléculaires sont encadrés)

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Les radicaux propylcyclohexylperoxy (RO_2) réagissent alors uniquement via les réactions d'isomérisation pour générer des radicaux hydroperoxyalkyles. Ces radicaux forment alors principalement des éthers cycliques (ou bicycliques) mais ne s'additionnent que très marginalement avec l'oxygène. Ces éthers sont alors consommés par des réactions de métathèse, formant des radicaux oxoalkyles qui se décomposent par rupture d'une liaison C−C.

Les alcènes formés à partir des radicaux propylcyclohexyles disparaissent selon 2 processus d'égale importance, tous deux faisant intervenir le radical OH: les réactions de métathèse et les réactions d'addition du radical OH sur la double liaison. A la suite de la première voie, les radicaux allyliques formés réagissent avec les radicaux HO_2 et CH_3O_2 pour former des radicaux alkénoxy qui se décomposent par des réactions de β-scission C−C, formant des aldéhydes. Les radicaux hydroxyalkyles générés par le second processus réagissent ensuite avec l'oxygène pour former des composés carbonylés (mécanisme de Waddington [45], figure V.32).

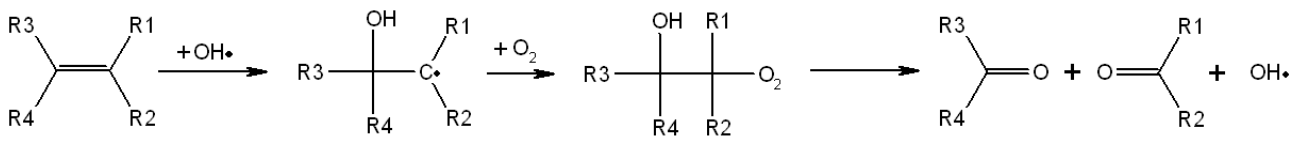


Figure V.32: Mécanisme de Waddington [45]

- La figure V.33 présente les voies de dégradation majoritaires du propylcyclohexane à 1050 K.

Comme aux plus basses températures le propylcyclohexane réagit selon des réactions de métathèse avec le radical OH (80%) et l'atome d'oxygène O (20%) pour former les radicaux propylcyclohexyles. Ces radicaux peuvent ensuite réagir via des réactions d'isomérisation (redistribution entre les isomères des radicaux propylcyclohexyles) ou peuvent former des alcènes (propénylcyclohexanes et propylcyclohexènes) via des réactions d'oxydation ou de rupture de liaisons C−H. Les réactions de décomposition par β-scission C−C représentent une voie minoritaire de consommation de ces radicaux propylcyclohexyles.

Les alcènes réagissent ensuite par décomposition suite à l'addition du radical OH, formant des aldéhydes et des radicaux alkyles (ou des radicaux oxoalkyles lorsque la double liaison est localisée sur le cycle) ou selon des réactions de métathèse avec le radical OH pour former des radicaux allyliques qui se décomposent par coupure d'une liaison C−C.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

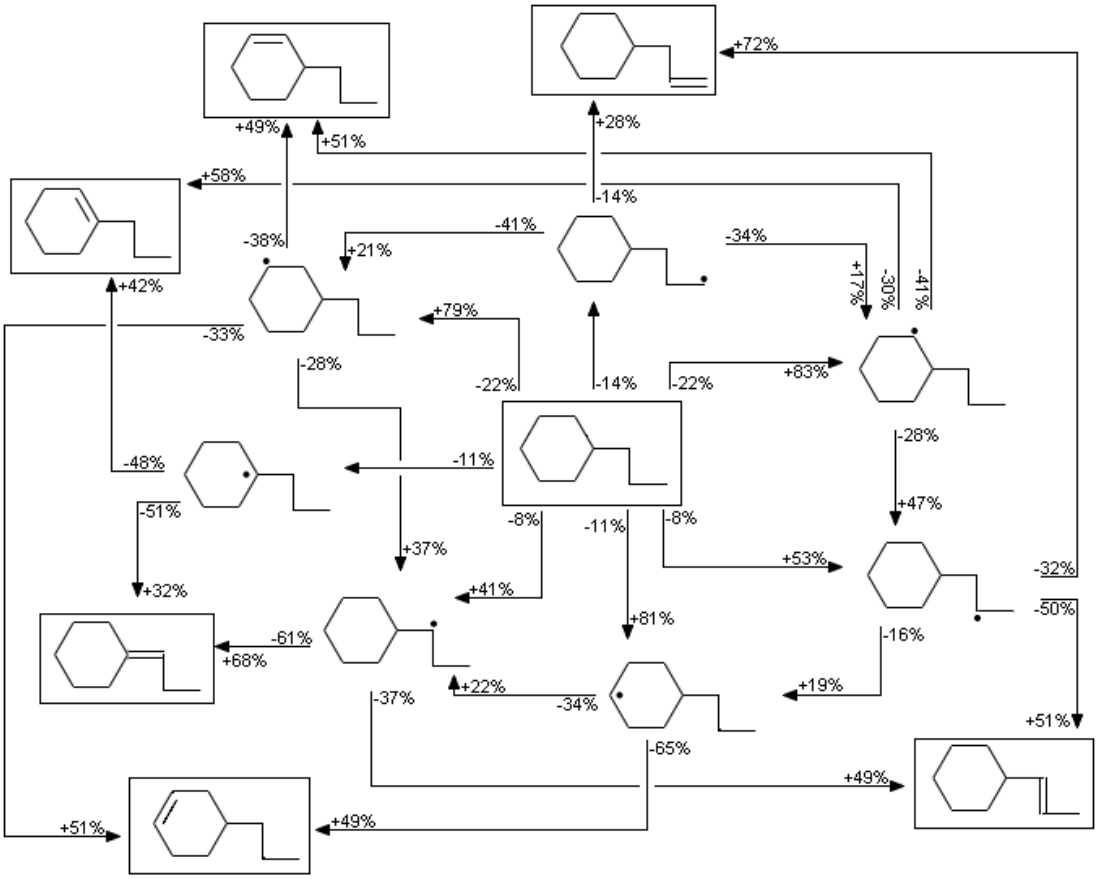


Figure V.33: Voies de dégradation principales du n-propylcyclohexane lors de l'oxydation d'un mélange n-propylcyclohexane/oxygène/azote (P=10 atm, φ=0,25) en réacteur auto-agité à T=1050 K (les composés moléculaires sont encadrés)

d) *Analyses de sensibilité*

Grâce à notre modèle nous avons pu mener une analyse de sensibilité à faible richesse et haute pression. Nous avons ainsi déterminé les réactions auxquelles le profil de propylcyclohexane est le plus sensible. Les résultats de cette analyse sont présentés sur la figure V.34 pour les réactions les plus importantes.

Les réactions les plus influentes à basse température sont les réactions de métathèse du propylcyclohexane avec le radical OH (R4867-4873) et plus particulièrement celles arrachant un atome d'hydrogène situé sur le cycle (R4870-4873). Aux températures les plus faibles (T<630 K), on remarque que l'effet promoteur des réactions R4871 et R4872 est fortement marqué alors que la réaction R4870 tend à ralentir la consommation du propylcyclohexane. Parallèlement, la réaction R180 ($CH_2O + OH = HCO + H_2O$), en consommant des radicaux OH, ralentit la consommation du

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

propylcyclohexane. Ces observations sont équivalentes à celles faites lors de l'oxydation du n-décane.

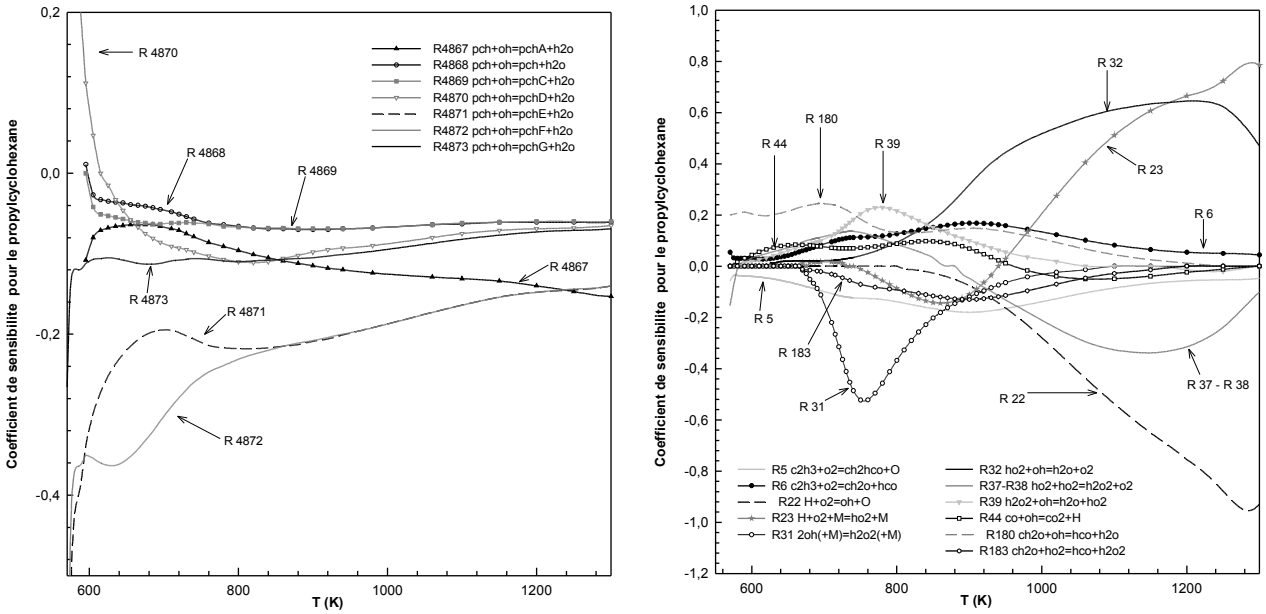


Figure V.34: Coefficients de sensibilité pour le propylcyclohexane lors de l'oxydation du n-propylcyclohexane en réacteur auto-agité à 10 atm et φ=0,25

Dès 670 K, la réaction R31 (2 OH (+ M) = H_2O_2 (+ M)) présente un coefficient de sensibilité négatif qui passe par un optimum à 750 K puis augmente. Cette température de 750 K correspond à la fin de la zone du coefficient négatif de température. C'est également à cette température que les réactions R37 et R38 (2 HO_2 = H_2O_2 + O_2) présentent un coefficient de sensibilité maximum. Ces 2 dernières réactions présentent le même comportement que celui observé lors de l'étude du n-décane: le coefficient passe par un maximum autour de 750 K puis diminue et devient négatif, indiquant que la réaction favorise alors la consommation du propylcyclohexane. Ce comportement particulier s'explique de la même manière que précédemment. Au-dessous de 750 K la molécule de peroxyde d'hydrogène forme préférentiellement le radical hydroperoxy, alors qu'au-delà de cette température, elle se décompose en 2 radicaux OH fortement réactifs.

Les réactions entre l'atome d'hydrogène et l'oxygène moléculaire ont également un fort impact sur la consommation du propylcyclohexane. Dès 800 K, la réaction R22 (H + O_2 = OH + O) a un coefficient de sensibilité négatif, qui ne va cesser de décroître avec la température. L'effet de la réaction concurrente R23 (H + O_2 + M = HO_2 + M) est différent et varie avec la température. Si elle

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

favorise la consommation du réactif initial entre 700 et 950 K, elle tend au-delà à la ralentir en concurrençant la réaction de ramification R22 (alors que R23 est une réaction de propagation).

Au-delà de 880 K, la réaction R32 ($HO_2 + OH = H_2O + O_2$) présente un coefficient de sensibilité positif très élevé. Ceci s'explique par le fait qu'elle transforme 2 radicaux en 2 molécules, entraînant une baisse de réactivité.

4. Le sous-mécanisme du n-butylbenzène

4.1 Le mécanisme de Ribaucour et al [46]

Le seul mécanisme d'oxydation du butylbenzène disponible dans la littérature a été proposé par Ribaucour *et al* [46]. Ce mécanisme qui comprend les réactions relatives au mécanisme de basse température de cet hydrocarbure a été validé par simulation des délais d'auto-inflammation de mélanges stœchiométriques butylbenzène/air mesurés en machine à compression rapide. Les délais prédits par le modèle sont en bon accord avec l'expérience.

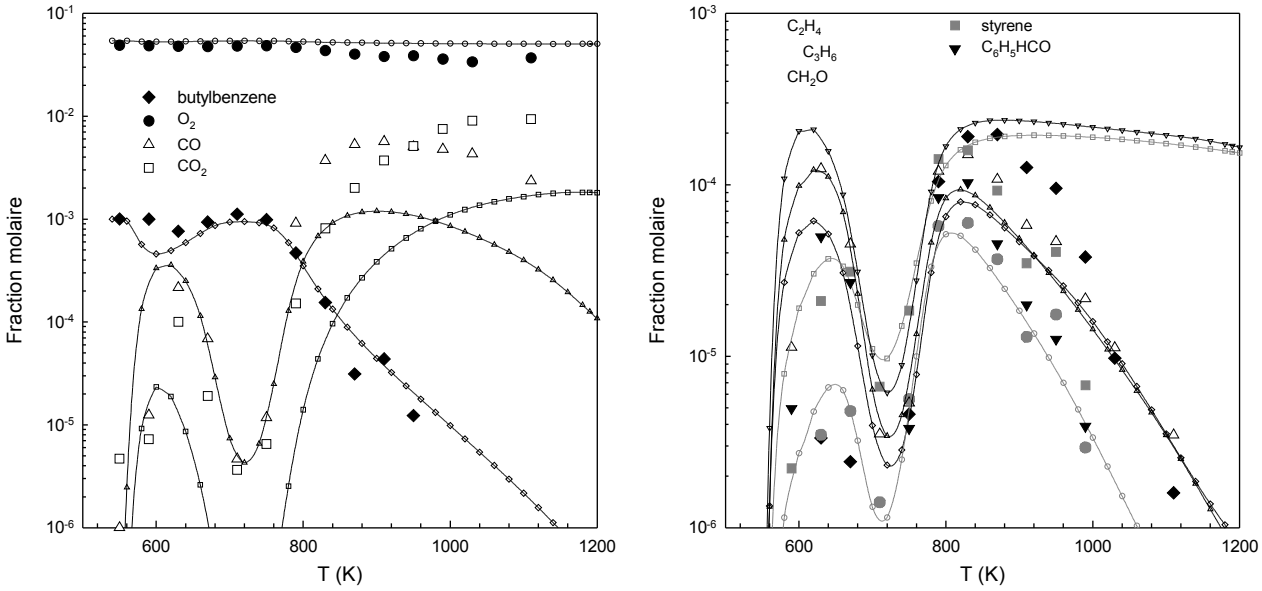


Figure V.35: Confrontation modèle de Ribaucour *et al* [46] (lignes)-expérience (symboles): oxydation du butylbenzène en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de $C_{10}H_{14}$ et 54000 ppm de O_2 ; φ=0,25 et τ=1000 ms)

Nous avons tenté de modéliser les résultats obtenus durant cette étude de l'oxydation du butylbenzène avec ce modèle. La comparaison entre profils simulés et expérimentaux est présentée sur les figures V.35 et V.36 dans le cas des richesses 0,25 et 1 respectivement. On constate que

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

globalement le modèle reproduit de manière convenable l'oxydation de basse température du butylbenzène. Par contre, au-delà de 800 K le modèle fournit des résultats en désaccord avec l'expérience: la production de CO et CO_2 est trop faible, celle de C_2H_4 également, et le styrène et le benzaldéhyde s'accumulent.

Ces résultats s'expliquent par l'absence d'une part des voies réactionnelles de haute température du butylbenzène, et celle d'autre part d'un sous-mécanisme des aromatiques benzène-toluène-styrène. Ce mécanisme mérite donc d'être complété pour être apte à simuler l'oxydation du butylbenzène dans un plus large domaine de température.

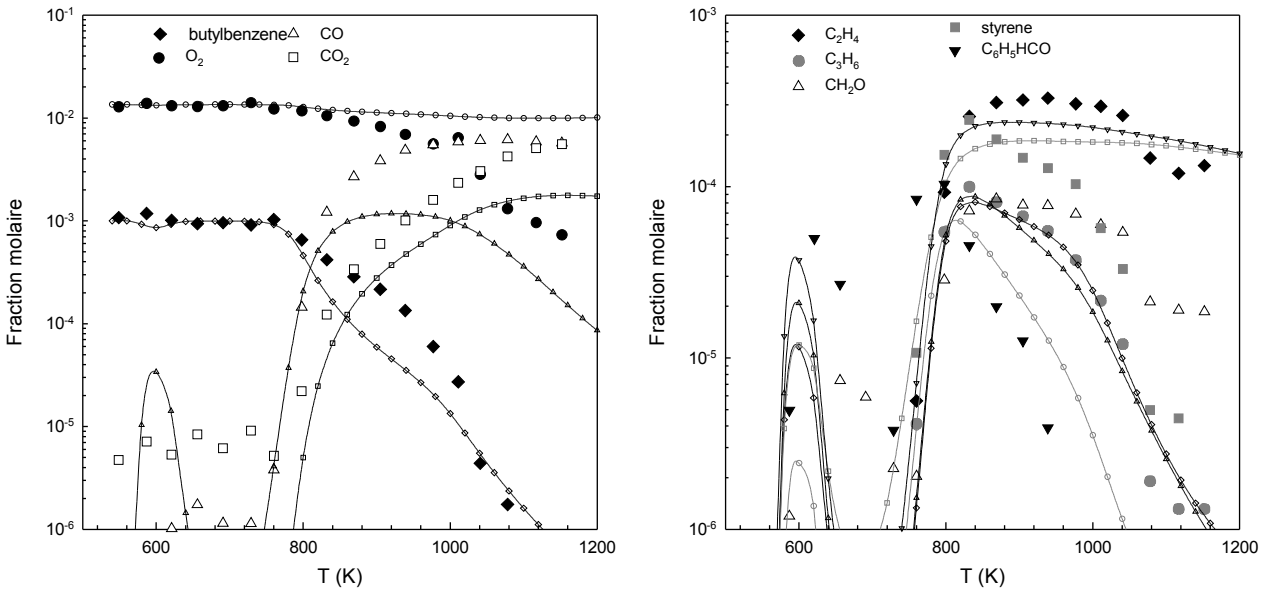


Figure V.36: Confrontation modèle de Ribaucour *et al* [46] (lignes)-expérience (symboles): oxydation du butylbenzène en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de $C_{10}H_{14}$ et 13500 ppm de O_2 ; φ=1,0 et τ=1000 ms)

4.2 Construction du sous-mécanisme du butylbenzène

Le sous-mécanisme du butylbenzène a été écrit en s'appuyant sur les travaux de Mati [25] et de Ribaucour [46].

a) base aromatique benzène-propylbenzène

La dégradation des alkylaromatiques supérieurs nécessite la présence d'un sous-mécanisme de dégradation du benzène et du toluène. En effet les radicaux phényl, phénoxy et benzyle sont des intermédiaires clés dans la dégradation de ces hydrocarbures. Nous avons pour cela repris les

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

réactions utilisées par Mati [25]. De la même manière, nous avons inclus dans notre mécanisme les réactions d'oxydation de l'éthylbenzène et du propylbenzène.

Nous avons cependant apporté quelques modifications, répertoriées dans le tableau V.13, à cette base. Parmi les réactions modifiées, on trouve la réaction $C_6H_5CH_2 + HO_2 = C_6H_5CH_2O + OH$ ainsi que les réactions de décomposition du radical benzoxy. Cette réaction joue un rôle important dans la formation du benzaldéhyde. Hippler *et al* [47] puis Ellis *et al* [48] ont déterminé pour cette réaction une constante de vitesse égale à 5.10^{12} $cm^3.mol^{-1}.s^{-1}$. Mais Sivaramakrishnan *et al* [49] ont dans leur mécanisme d'oxydation du toluène proposé une valeur 100 fois plus élevée pour pouvoir reproduire correctement leurs résultats expérimentaux. Dans notre mécanisme, une valeur intermédiaire de 2.10^{13} $cm^3.mol^{-1}.s^{-1}$ a été employée permettant de reproduire de manière satisfaisante les profils de benzaldéhyde et de toluène.

b) sous-mécanisme de basse température

Les réactions d'oxydation de basse température du butylbenzène présentes dans le mécanisme proviennent du mécanisme de Ribaucour *et al* [46]. Nous y avons apporté tout de même quelques modifications.

Comme lors du n-décane et du n-propylcyclohexane, nous avons renommé les différentes espèces dans le système utilisé jusqu'à présent, et dont la correspondance indice-position est indiquée sur la figure V.37.

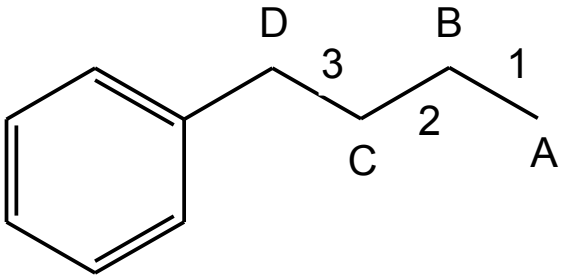


Figure V.37: Nomenclature utilisée dans le modèle pour les dérivés du butylbenzène

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

réaction	Mati [25]	Cette étude	Référence
$C_6H_6+HO_2 \leftrightarrows C_6H_5+H_2O_2$	$1{,}52.10^{11}.exp(-17000/RT)$	$5{,}4.10^{4}.T^{2,5}.exp(-27620/RT)$	Scott *et al* [50]
$C_6H_6+OH \leftrightarrows C_6H_5+H_2O$	$1{,}63.10^{8}.T^{1,4}.exp(-1450/RT)$	$1{,}69.10^{13}.exp(-4574/RT)$	Baulch [51]
$C_6H_5+O_2 \leftrightarrows C_6H_5O+O$	$1{,}52.10^{11}.exp(-17000/RT)$	$6{,}27.10^{12}.exp(-7470/RT)$	Emdee, Brezinsky [52], k*3
$C_6H_5O \leftrightarrows C_5H_5+CO$	$8{,}00.10^{13}.exp(-55400/RT)$	$7{,}4.10^{11}.exp(-43917/RT)$	Franck [53]
$C_6H_5CH_3+OH \leftrightarrows C_6H_5CH_2+H_2O$	$1{,}61.10^{9}.T^{1}.exp(-870/RT)$	$1{,}77.10^{5}.T^{2,39}.exp(602/RT)$	Seta [54]
$C_6H_5CH_3+OH \leftrightarrows C_6H_5OH+CH_3$	/	$7{,}83.10^{2}.T^{2,88}.exp(-3221/RT)$	
$C_6H_5CH_3+H \leftrightarrows C_6H_5CH_2+H_2$	$7{,}59.10^{-5}.T5^{,5}.exp(-340/RT)$	$1{,}26.10^{14}.exp(-8364/RT)$	Hippler *et al* [55]
$C_6H_5C_2H_5 \leftrightarrows C_6H_5CH_2+CH_3$	$1{,}0.10^{15}.exp(-70000/RT)$	$5{,}0.10^{16}.exp(-78100/RT)$	Estimation selon Dean [40]
$C_6H_5C_2H_5 \leftrightarrows C_6H_5+C_2H_5$	$1{,}0.10^{16}.exp(-100000/RT)$	$5{,}0.10^{16}.exp(-100400/RT)$	
$C_6H_5C_2H_5 \leftrightarrows H+C_6H_5CH_2CH_2$	$2{,}51.10^{15}.exp(-83260/RT)$	$8{,}0.10^{15}.exp(-100200/RT)$	
$C_6H_5CH_2CH_2CH_2 \leftrightarrows C_2H_4+C_6H_5CH_2$	$1{,}0.10^{14}.exp(-13000/RT)$	$2{,}0.10^{13}.exp(-12836/RT)$	Estimation selon Dean [40]
$C_6H_5CH_2CHCH_3 \leftrightarrows C_6H_5+C_3H_6$	$1{,}0.10^{14}.exp(-34800/RT)$	$2{,}0.10^{13}.exp(-35390/RT)$	
$C_6H_5CH_2CH_2CH_3 \leftrightarrows nC_3H_7+C_6H_5$	$5{,}0.10^{16}.exp(-86500/RT)$	$1{,}0.10^{17}.exp(-86500/RT)$	Ristori *et al* [33]
$C_6H_5CH_2CH_2CH_3 \leftrightarrows C_2H_5+C_6H_5CH_2$	$5{,}0.10^{16}.exp(-73500/RT)$	$8{,}0.10^{15}.exp(-73500/RT)$	
$C_6H_5CH_2CH_2CH_3 \leftrightarrows CH_3+C_6H_5CH_2CH_2$	$5{,}0.10^{16}.exp(-77500/RT)$	$1{,}0.10^{16}.exp(-77500/RT)$	
$C_6H_5CH_2CH_2CH_3+H \leftrightarrows nC_3H_7+C_6H_6$	$5{,}78.10^{13}.exp(-8090/RT)$	$2{,}4.10^{13}.exp(-5123/RT)$	Analogie avec le toluène [56]

Tableau V.13: Constantes de vitesse modifiées dans la base benzène-propylbenzène proposée par Mati [25] (unités: cm^3, s, cal, mol, K)

Nous avons par la suite modifié les voies de dégradation des hétérocycles oxygénés. En effet dans le mécanisme de Ribaucour, les éthers sont consommés par métathèse et se décomposent immédiatement en 2-propénylbenzène et radical formyle, quel que soit l'isomère initial. Nous avons

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

introduit une étape d'ouverture du cycle qui est considérée très rapide par rapport à l'étape d'arrachement d'un atome d'hydrogène et qui forme un radical phényloxoalkyle. Ce radical se décompose ensuite par rupture de liaison C−C formant une espèce carbonylée.

Nous avons également modifié certains paramètres cinétiques proposés par Ribaucour, et notamment ceux correspondant aux réactions d'addition des radicaux avec l'oxygène. Nous avons utilisé pour les radicaux 1-phényl-2-butyle, 1-phényl-3-butyle et 1-phényl-4-butyle les constantes de vitesse proposées par DeSain *et al* [10] pour les radicaux propyles et isopropyles. Concernant le radical 1-phényl-1-butyle, qui est un radical stabilisé par résonance, nous avons considéré que la constante de vitesse de la réaction de fixation de l'oxygène est équivalente à celle impliquant le radical allyle. Cette constante de vitesse a été calculée par Lee *et al* [57]. Le tableau V.1 récapitule les constantes de vitesse utilisées pour ces réactions.

réaction	**Ribaucour [46]**	**Cette étude**	**Référence**
$C_6H_5(CH_2)_3CH_2+O_2 \leftrightarrows C_6H_5(CH_2)_3CH_2O_2$	$2{,}0.10^{12}$	$4{,}82.10^{36}.T^{-8{,}23}.\exp(-5167/RT)$	
$C_6H_5(CH_2)_2CHCH_3+O_2 \leftrightarrows C_6H_5(CH_2)_2CH(O_2)CH_3$	$2{,}0.10^{12}$	$1{,}84.10^{45}.T^{-11{,}1}.\exp(-6538/RT)$	De Sain *et al* [10]
$C_6H_5CH_2CHCH_2CH_3+O_2 \leftrightarrows C_6H_5CH_2CH(O_2)CH_2CH_3$	$2{,}0.10^{12}$	$1{,}84.10^{45}.T^{-11{,}1}.\exp(-6538/RT)$	
$C_6H_5CH(CH_2)_2CH_3+O_2 \leftrightarrows C_6H_5CH(O_2)(CH_2)_2CH_3$	$4{,}58.10^{11}.\exp(378/RT)$	$2{,}43.10^{39}.T^{-8{,}96}.\exp(-8620/RT)$	Lee *et al* [57]

Tableau V.14: Constantes de vitesse des réactions d'addition avec l'oxygène des radicaux phénylbutyles (unités: cm^3, s, cal, mol, K)

c) sous-mécanisme de haute température

Les réactions proposées pour représenter le mécanisme d'oxydation de haute température du butylbenzène s'appuient sur le schéma de dégradation des alkylaromatiques supérieurs proposé par l'équipe de Princeton [58] et qui consiste en:

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Réaction	Constante de vitesse	référence
phc4h9=pc4h9+c6h5	$5{,}0.10^{16}$.exp(-86500/RT)	
phc4h9=phch2+nc3h7	$4{,}0.10^{15}$.exp(-76260/RT)	
phc4h9=Aphc2h4+c2h5	$5{,}0.10^{16}$.exp(-78500/RT)	
phc4h9=pbzjA+ch3	$5{,}0.10^{16}$.exp(-86750/RT)	
phc4h9=Aphc4h8+H	$9{,}0.10^{15}$.exp(-101120/RT)	
phc4h9=Bphc4h8+H	$6{,}0.10^{15}$.exp(-98460/RT)	
phc4h9=Cphc4h8+H	$6{,}0.10^{15}$.exp(-98460/RT)	
phc4h9=Dphc4h8+H	$6{,}0.10^{15}$.exp(-86515/RT)	
Dphc4h8=phc4h7-3+H	$1{,}2.10^{13}$.exp(-47900/RT)	Estimation selon les recommandations de Dean [40]
Cphc4h8=phc4h7-3+H	$1{,}2.10^{13}$.exp(-36000/RT)	
Cphc4h8=phc4h7-2+H	$1{,}2.10^{13}$.exp(-33400/RT)	
Bphc4h8=phc4h7-2+H	$1{,}2.10^{13}$.exp(-33400/RT)	
Bphc4h8=phc4h7-1+H	$1{,}8.10^{13}$.exp(-31300/RT)	
Aphc4h8=phc4h7-1+H	$1{,}2.10^{13}$.exp(-28600/RT)	
Dphc4h8=styren+c2h5	$2{,}0.10^{13}$.exp(-31800/RT)	
Cphc4h8=ch3+phc3h5-1	$2{,}0.10^{13}$.exp(-24000/RT)	
Cphc4h8=c6h5+c4h8	$2{,}0.10^{13}$.exp(-39500/RT)	
Dphsecb=styren+c2h5	$2{,}0.10^{13}$.exp(-18600/RT)	
c3h6+phch2=Bphc4h8	$8{,}5.10^{10}$.exp(-11300/RT)	estimation
Aphc2h4+c2h4=Aphc4h8	$2{,}41.10^{49}.T^{-11{,}67}$.exp(-28800/RT)	
Aphc4h8=Dphc4h8	$6{,}0.10^{11}$.exp(-14000/RT)	
Aphc4h8=Cphc4h8	$4{,}5.10^{12}$.exp(-35000/RT)	Freund et Olmstead [59]
Cphc4h8=Bphc4h8	$1{,}2.10^{13}$.exp(-36000/RT)	
Cphc4h8=Dphc4h8	$1{,}2.10^{13}$.exp(-35000/RT)	
Cphc4h8=Dphsecb	$2{,}0.10^{11}$.exp(-20000/RT)	Litzinger [60]

Tableau V.15: Principales réactions d'oxydation de haute température du butylbenzène (unités: cm^3, s, cal, mol, K)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

- réactions d'amorçage unimoléculaire par rupture de liaisons C−C ou C−H
- réaction de déplacement de la chaîne latérale par un atome d'hydrogène (butylbenzène + H ⇆ benzène + n-butyle)
- décomposition des radicaux phénylbutyles par rupture de liaisons C−C ou C−H
- réactions d'isomérisation des radicaux phénylbutyles
- réaction d'isomérisation du radical 1-phényl-2-butyle par transfert 1,3 du groupement phényl pour former le radical 2-phényl-1-butyle

Les constantes de vitesse associées à ces processus ont été estimées par différentes méthodes. Pour les réactions impliquant la rupture de liaisons C−C ou C−H, elles ont été calculées en suivant les recommandations de Dean [40], à l'exception des réactions de décomposition des radicaux 1-phényl-3-butyle et 1-phényl-4-butyle.

Nous avons utilisé les paramètres cinétiques proposés par Freund et Olmstead [59] dans leur mécanisme de pyrolyse du butylbenzène pour les réactions d'isomérisation des radicaux phénylbutyles. De la même manière, la constante de vitesse de la réaction d'isomérisation par transfert du noyau aromatique est celle proposée par Litzinger *et al* [60] dans le cas du radical 1-phényl-2-propyle.

4.3 Simulations en réacteur auto-agité

a) Oxydation du benzène, toluène et propylbenzène

Nous avons vérifié dans un premier temps que les modifications apportées au sous-mécanisme des aromatiques n'ont pas dégradé les aptitudes du modèle à simuler l'oxydation du benzène, du toluène et du propylbenzène en réacteur auto-agité.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

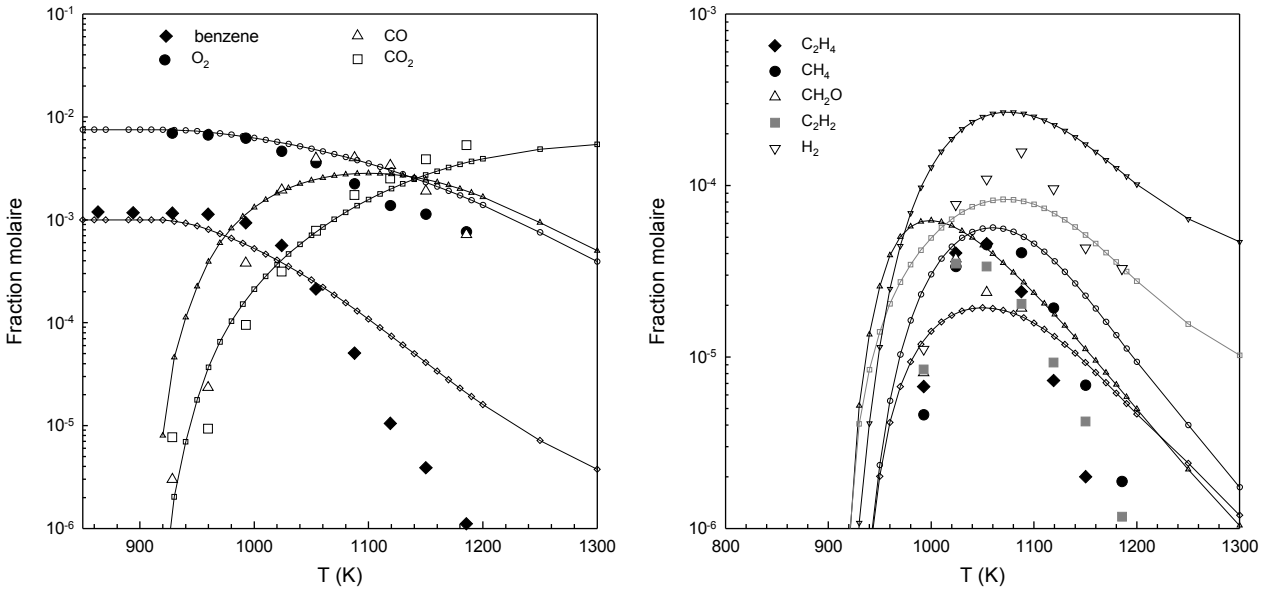


Figure V.38: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du benzène en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de C_6H_6 et 7500 ppm de O_2 ; φ=1,00 et τ=500 ms) (Marchal [61])

L'oxydation de ces hydrocarbures a été simulée en réacteur auto-agité à la stœchiométrie et à une pression de 10 atm. La comparaison entre les résultats expérimentaux et les prévisions du modèle est présentée pour le benzène, le toluène et le propylbenzène sur les figures V.38, V.39 et V.40 respectivement.

On remarque que lors de l'oxydation du benzène, le modèle prévoit une consommation trop lente de ce réactif au-delà de 1050 K. D'autre part, le modèle sous-estime la formation d'éthylène alors qu'il surestime celle de l'hydrogène. Quant aux autres produits, on observe un accord global correct entre les profils simulés et expérimentaux, qui est légèrement meilleur que celui obtenu avec le modèle de Mati [25].

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

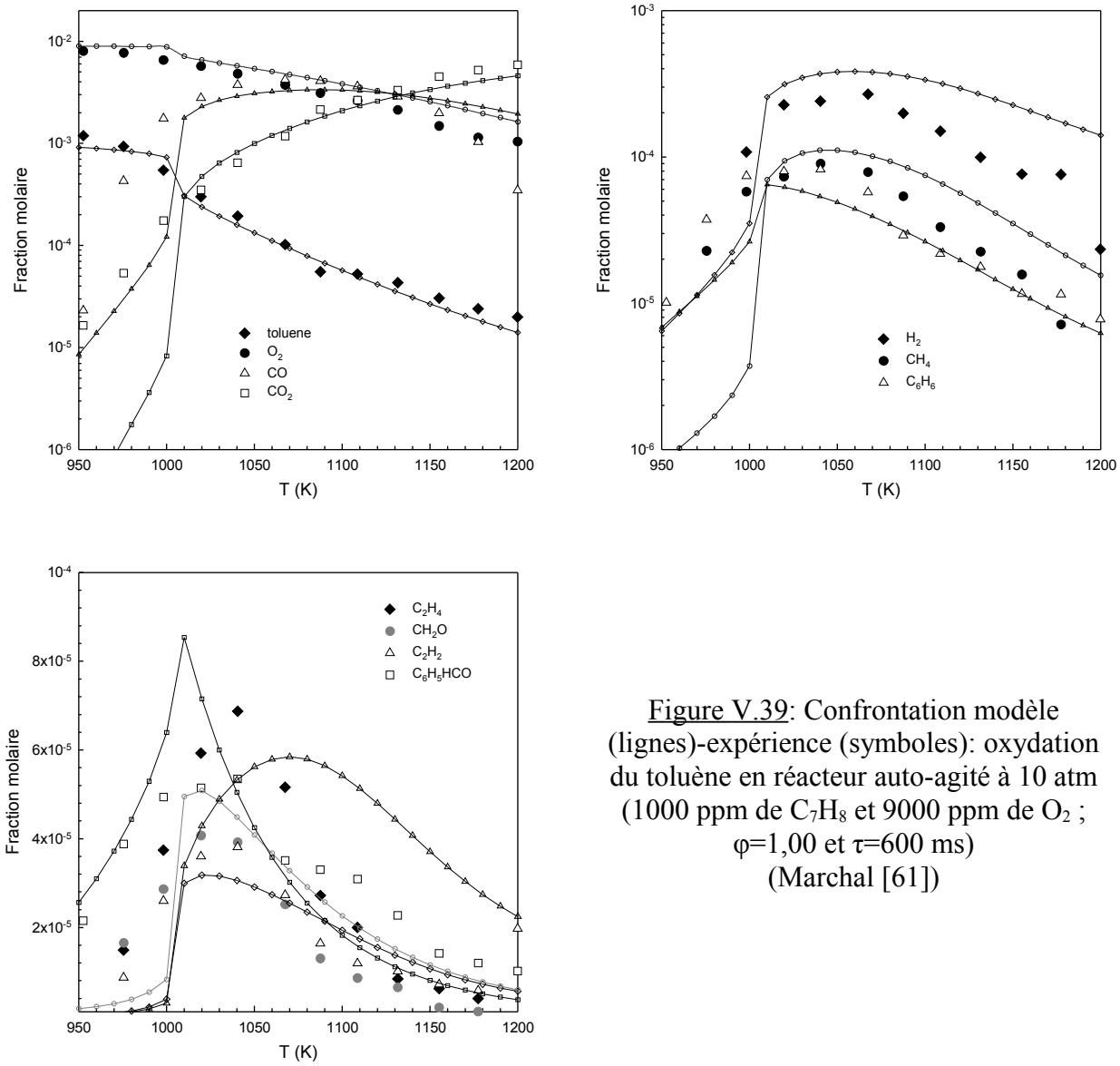


Figure V.39: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du toluène en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de C_7H_8 et 9000 ppm de O_2 ; φ=1,00 et τ=600 ms) (Marchal [61])

Le modèle reproduit convenablement l'oxydation du toluène. Il a néanmoins tendance à sous-estimer les concentrations en monoxyde et dioxyde de carbone à température modérée (<1000 K). De plus, comme lors de l'oxydation du benzène, le modèle sous-estime la formation de C_2H_4 et surestime celle de H_2, ainsi que celle de benzaldéhyde et de l'acétylène. L'accord expérience-simulation est aussi bon que celui obtenu avec le mécanisme de Mati [25], mais notre modèle reproduit bien mieux le profil de CO.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

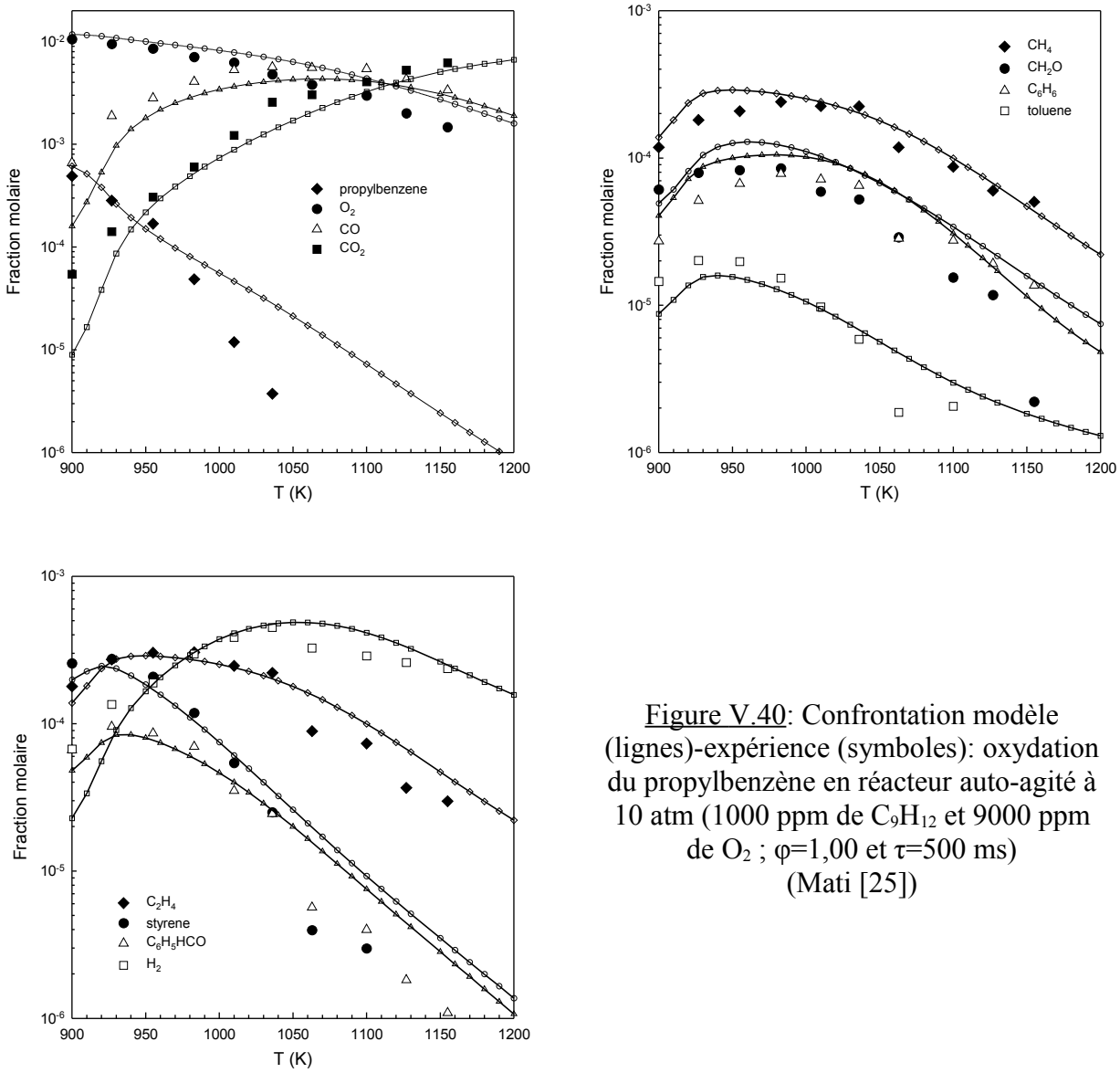


Figure V.40: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du propylbenzène en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de C_9H_{12} et 9000 ppm de O_2 ; φ=1,00 et τ=500 ms) (Mati [25])

Concernant l'oxydation du propylbenzène, on constate également un très bon accord entre l'expérience et le modèle, quel que soit l'intermédiaire considéré. Le principal problème réside dans la sous-consommation du propylbenzène au-dessus de 975 K.

Au vu de ces observations, on peut conclure que les modifications apportées n'ont pas perturbé les aptitudes du modèle à simuler l'oxydation des hydrocarbures aromatiques en réacteur auto-agité.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

b) *Oxydation du butylbenzène*

Après avoir vérifié que le modèle est toujours apte à simuler l'oxydation du benzène, du toluène et du n-propylbenzène, nous l'avons utilisé pour modéliser les résultats obtenus durant cette étude pour l'oxydation du butylbenzène à 10 atm. La confrontation entre les données expérimentales et modélisées est présenté sur les figures V.41 (φ=0,25), V.42 (φ=0,50), V.43 (φ=1,00) et V.44 (φ=1,50).

On peut premièrement constater que le modèle fournit des résultats en très bon accord avec les observations expérimentales. Cependant, le modèle sous-estime la concentration de CO et CO_2 à haute température (T>800 K). Parmi les autres espèces sous-estimées, on trouve également l'acétaldéhyde et, en milieu pauvre, le benzène. On remarque également que le propène est surestimé par le modèle à basse température. La concentration de l'acroléine est également surestimée par le modèle, mais le profil de concentration de ce composé est surtout décalé vers les plus hautes températures (décalage de +55 K environ). Le problème rencontré précédemment pour la formation de l'oxirane est aussi présent ici: cet éther cyclique n'est pas produit à basse température alors qu'il est surestimé à haute température.

De manière plus globale, on observe aussi que les simulations prévoient une reprise de réactivité au-delà de 700 K systématiquement trop précoce, entraînant une surestimation ponctuelle des principaux intermédiaires entre 700 et 780 K. Enfin le modèle prévoit en milieu stœchiométrique et riche une réactivité assez importante (formation de CO, aldéhydes) à basse température qui n'est pas observée expérimentalement.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

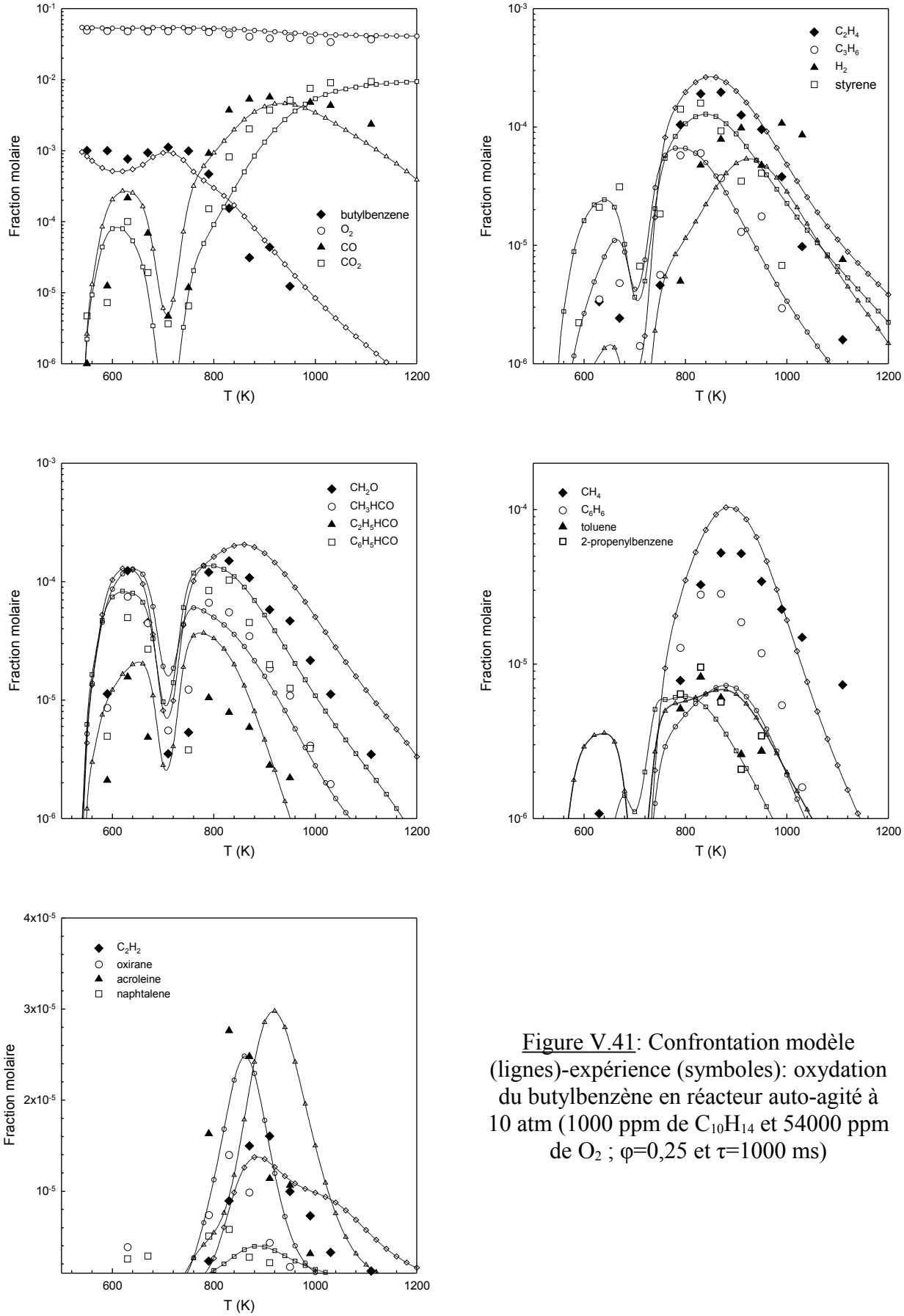


Figure V.41: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du butylbenzène en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de $C_{10}H_{14}$ et 54000 ppm de O_2 ; φ=0,25 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

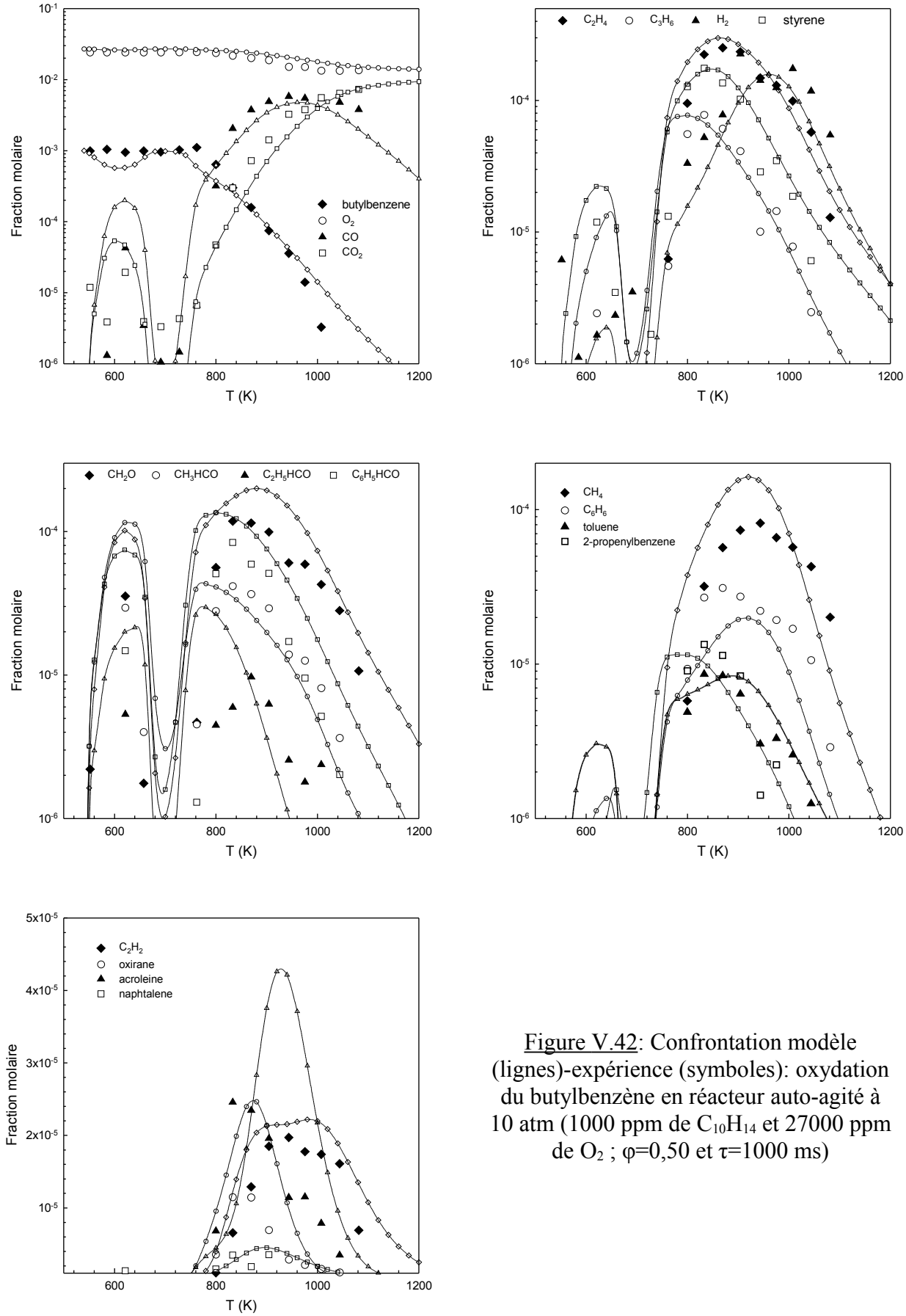


Figure V.42: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du butylbenzène en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de $C_{10}H_{14}$ et 27000 ppm de O_2 ; φ=0,50 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

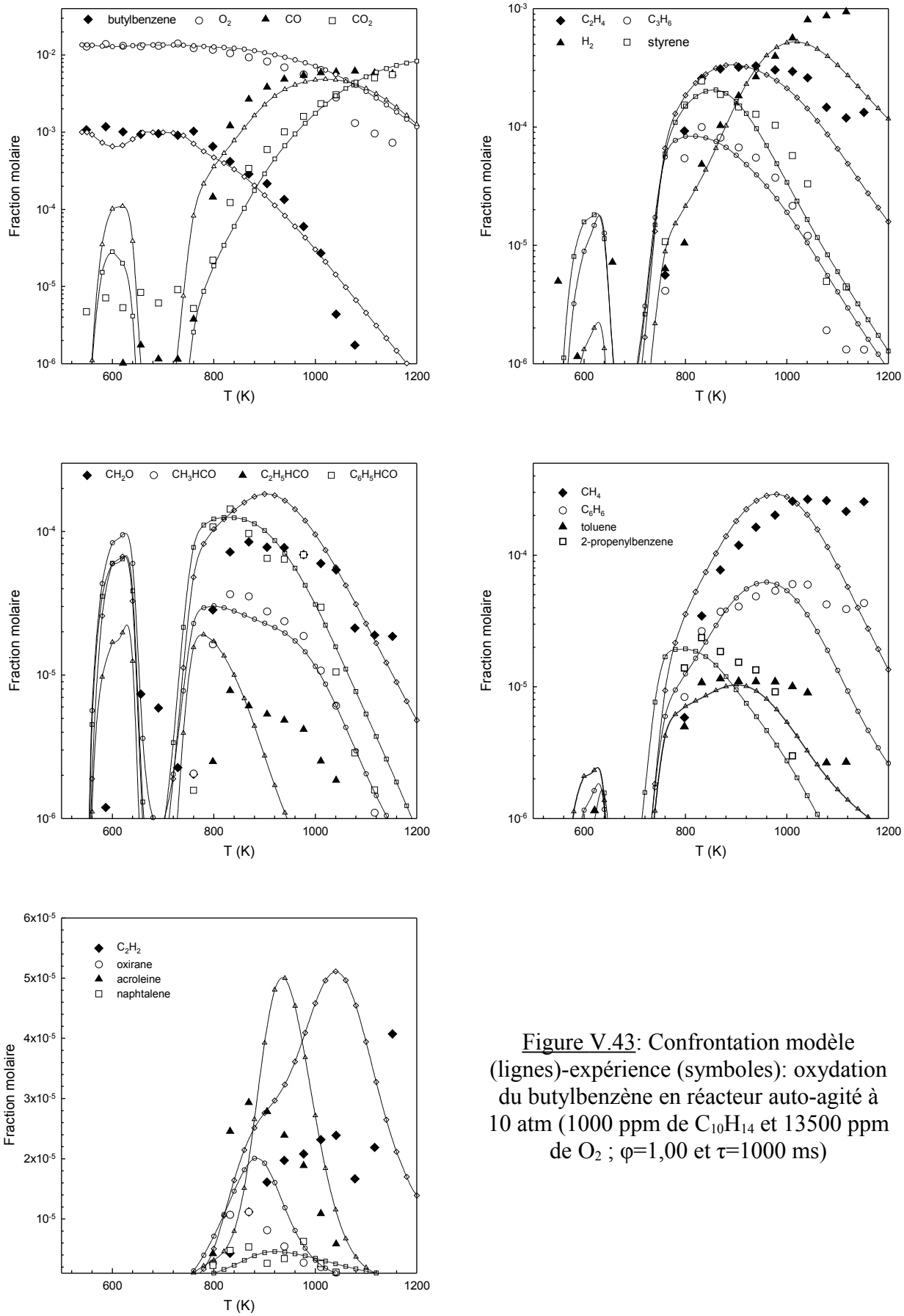


Figure V.43: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du butylbenzène en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de $C_{10}H_{14}$ et 13500 ppm de O_2 ; φ=1,00 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

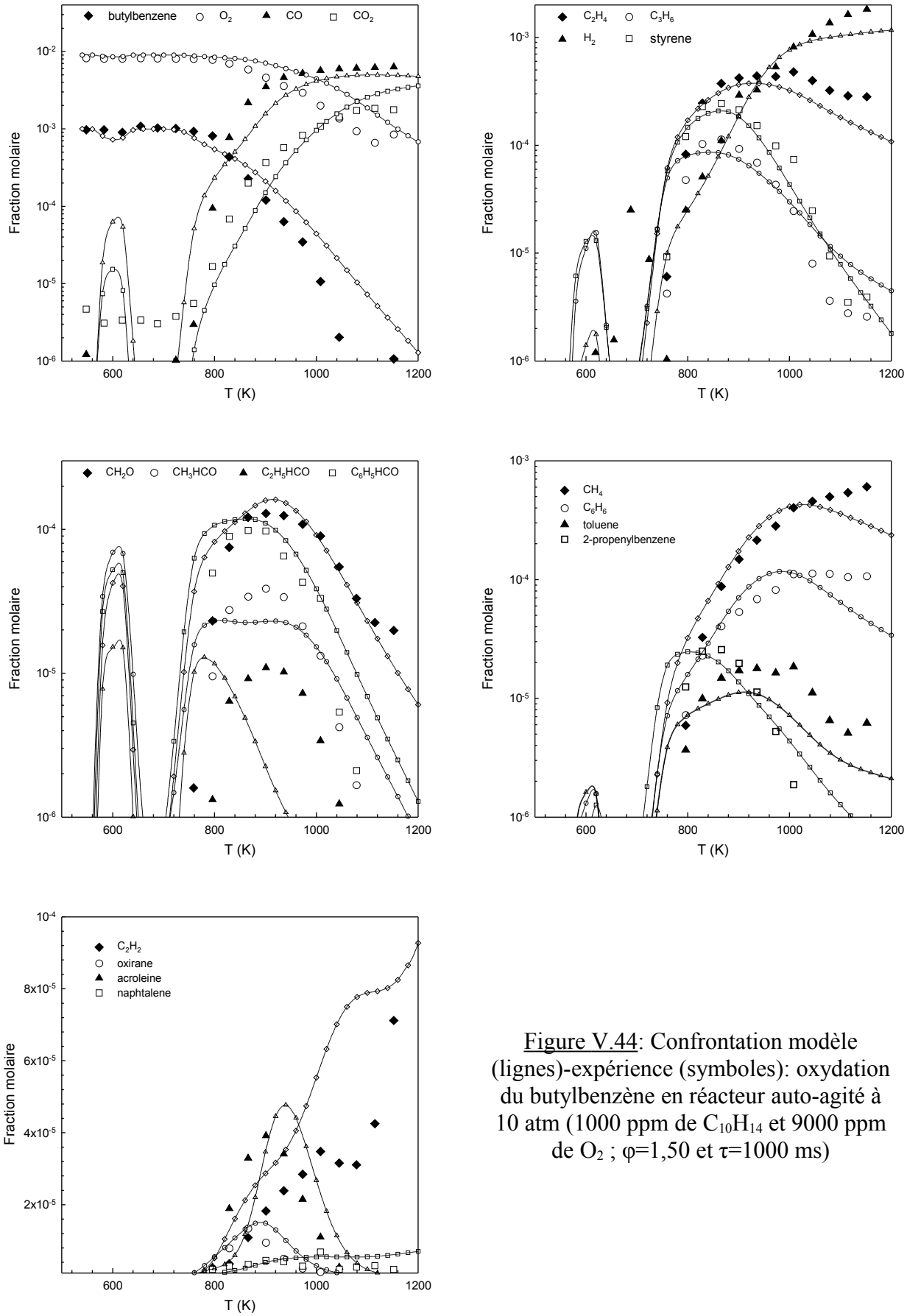


Figure V.44: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du butylbenzène en réacteur auto-agité à 10 atm (1000 ppm de $C_{10}H_{14}$ et 9000 ppm de O_2 ; φ=1,50 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

c) *Analyses de voies réactionnelles*

Nous avons grâce à notre mécanisme effectué une analyse de vitesse afin de dégager les voies de dégradation majoritaires du butylbenzène et des espèces qui en découlent. Cette analyse a été effectuée à 10 atm et pour une richesse de 0,25.

- Les voies de dégradation du butylbenzène à 650 K sont représentées sur la figure V.45.

A cette température, le butylbenzène est consommé par des réactions de métathèse avec le radical OH pour fournir les 4 radicaux phénylbutyles. Ces radicaux réagissent ensuite majoritairement voire exclusivement (radical 1-phényl-1-butyle) par addition avec l'oxygène pour générer des radicaux phénylbutylperoxy et dans une moindre mesure selon une réaction d'oxydation pour former des phénylbutènes. On note cependant que la réaction d'isomérisation du radical 1-phényl-4-butyle en radical 1-phényl-1-butyle représente 60% de la consommation de cette espèce et 25% de la formation du radical benzylique.

Les radicaux phénylbutylperoxy sont ensuite consommés par des réactions d'isomérisation pour former les radicaux hydroperoxyphénylbutyles, et plus particulièrement ceux dont le site radicalaire est localisé en position benzylique. Par la suite, selon les positions relatives du site radicalaire et du groupement hydroperoxy, les radicaux QO_2H vont se décomposer en phénylbutènes, en éther cyclique ou s'additionner avec l'oxygène. Dans ce dernier cas, les radicaux O_2QO_2H réagissent via une nouvelle réaction d'isomérisation pour ensuite se décomposer en composés carbonylés et libérer 2 radicaux.

- A 850 K, le butylbenzène réagit selon le schéma représenté sur la figure V.46.

Dans ces conditions de température et de pression, le butylbenzène réagit toujours par des réactions de métathèse pour donner en égales proportions les 4 radicaux phénylbutyles. Le radical 1-phényl-4-butyle (Aphc4h8) s'isomérise de manière presque totale (92%) en 1-phényl-1-butyle (Dphc4h8), qui est formé à près de 50% via cette réaction. Ce radical benzylique réagit pour 45% selon une réaction de décomposition par rupture C−C. Les 55% restants s'additionnent à l'oxygène. Ensuite ils s'isomérisent en QO_2H qui se décomposent en éthers cycliques, aldéhydes, cétones et/ou alcènes. Les 2 derniers radicaux phénylbutyles (Bphc4h8 et Cphc4h8) réagissent ensuite soit par oxydation pour former les phénylbutènes (64% pour Bph4h8 et 43% pour Cphc4h8), soit se dégradent par β-scission C−C. On remarque que la réaction d'isomérisation par transfert du groupement phényl est une voie minoritaire (5%) de consommation du radical 1-phenyle-2-butyle.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

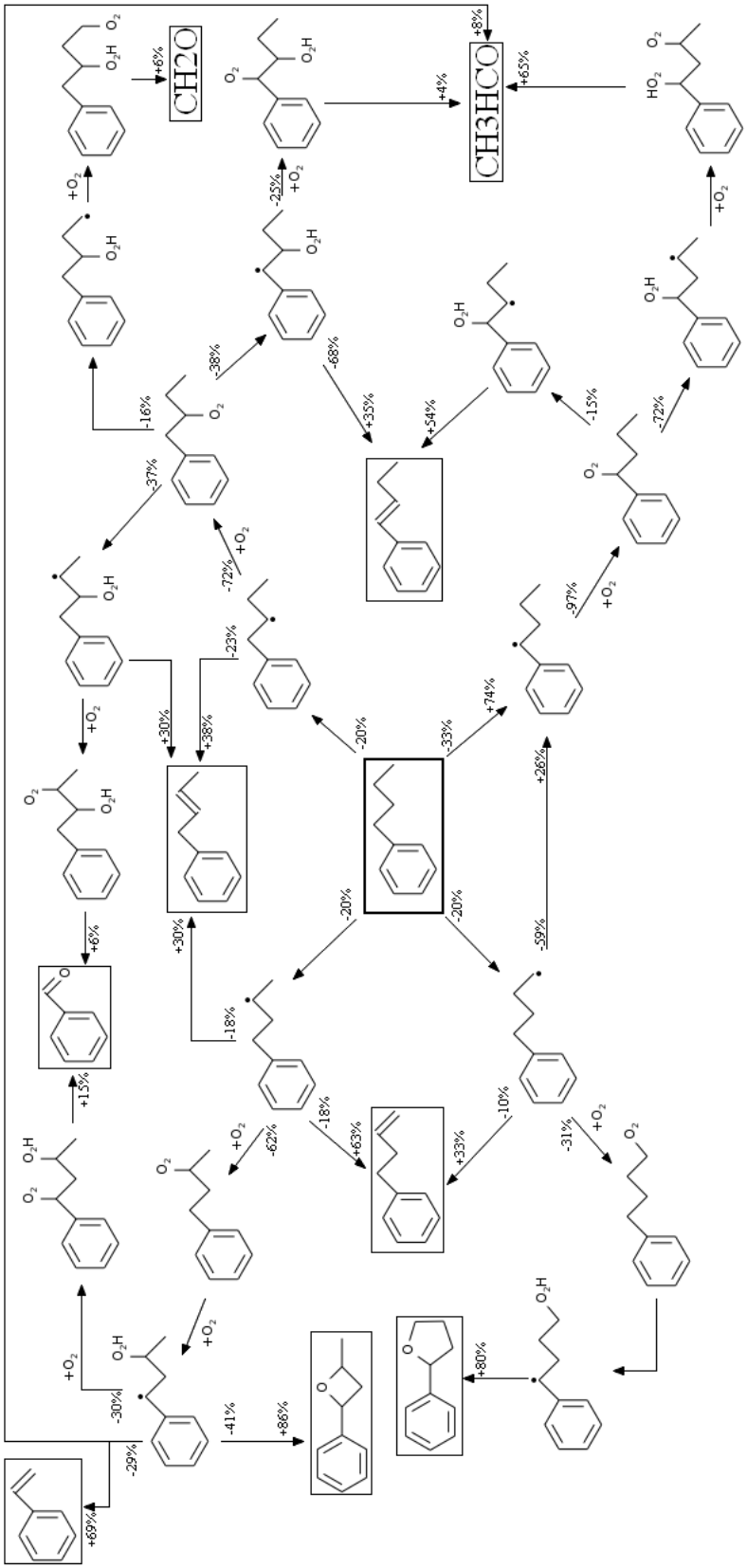


Figure V.45: Voies de dégradation principales du butylbenzène lors de l'oxydation d'un mélange butylbenzène/oxygène/azote (P=10 atm, φ=0,25) en réacteur auto-agité à 650 K

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

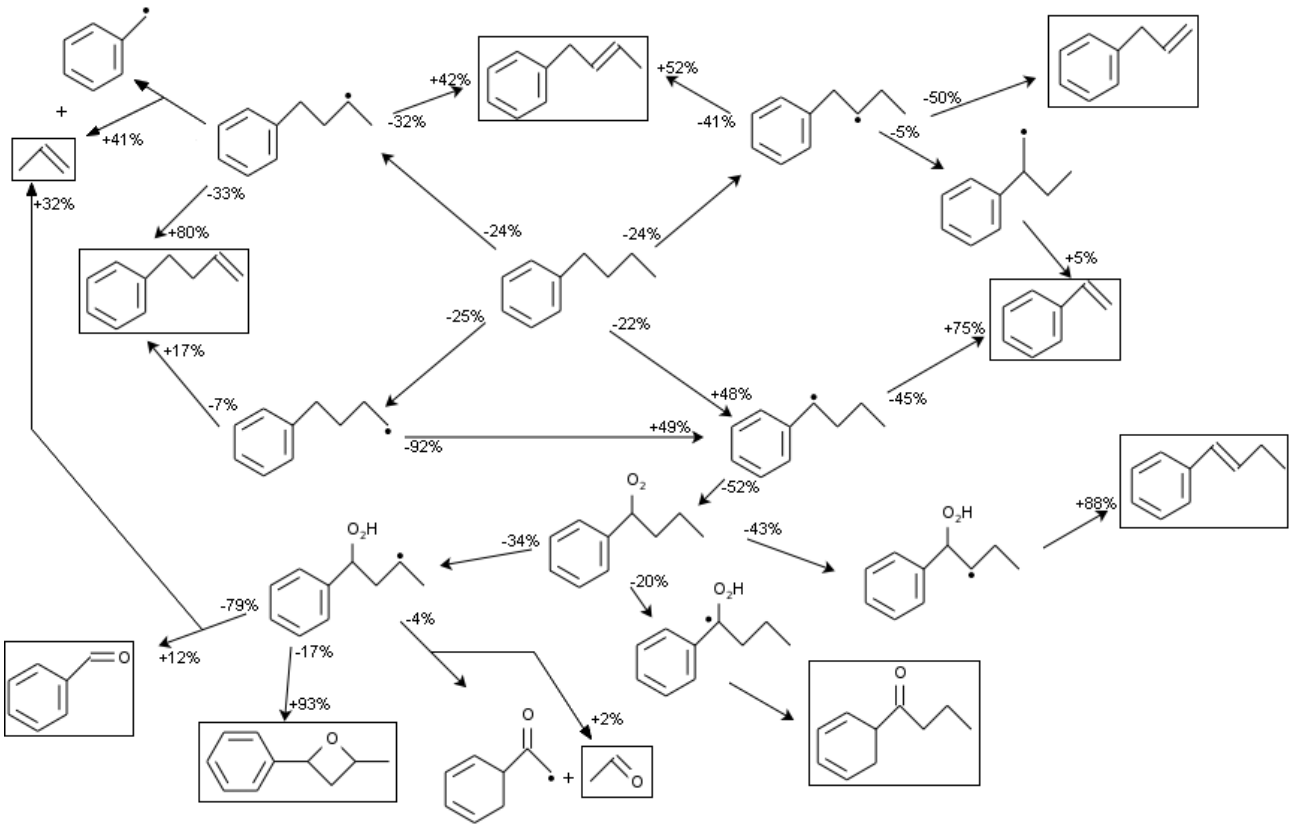


Figure V.46: Voies de dégradation principales du butylbenzène lors de l'oxydation d'un mélange butylbenzène/oxygène/azote (P=10 atm, φ=0,25) en réacteur auto-agité à 850 K. (les composés moléculaires sont encadrés)

- Le schéma de dégradation du butylbenzène à 1050 K est présenté sur la figure V.47.

A cette température, les voies mises en jeu pour la dégradation du butylbenzène et des radicaux phénylbutyles sont peu différentes de celles observées à 850 K. Toutefois les importances relatives des différentes voies diffèrent. Ainsi, le butylbenzène réagit toujours par métathèse. Le radical 1-phényl-4-butyle est toujours consommé quasi-uniquement (94%) par isomérisation en radical 1-phényl-1-butyle. Ce dernier réagit majoritairement par β-scission C−C pour former du styrène. Les 2 derniers isomères phénylbutyles réagissent toujours par décomposition unimoléculaire C−C (69% et 83% pour 1-phényl-3-butyle et 1-phényl-2-butyle respectivement) ou selon une réaction d'oxydation (30% pour 1-phényl-3-butyle et 10% pour 1-phényl-2-butyle).

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

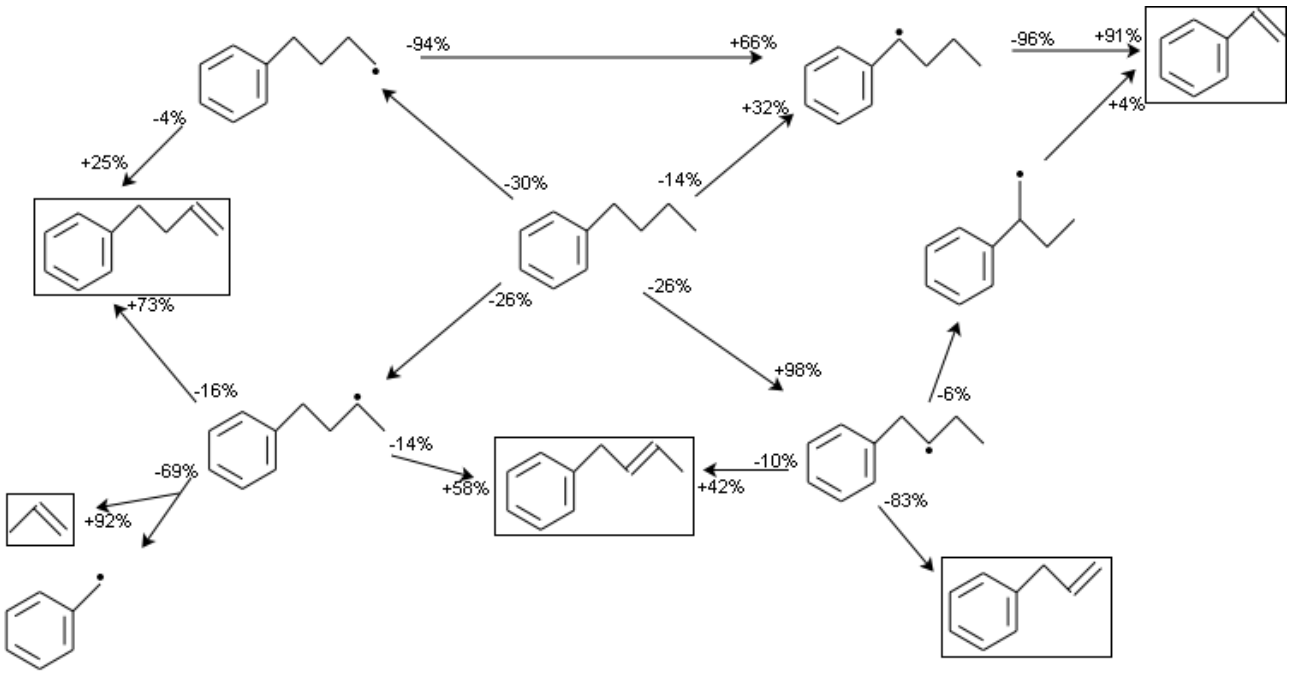


Figure V.47: Voies de dégradation principales du butylbenzène lors de l'oxydation d'un mélange butylbenzène/oxygène/azote (P=10 atm, φ=0,25) en réacteur auto-agité à 1050 K

d) Analyse de sensibilité

L'analyse de sensibilité a été effectuée à une richesse de 0,25 et une pression de 10 atm. Les coefficients de sensibilité pour le butylbenzène en fonction de la température sont présentés sur la figure V.48.

L'influence des réactions de métathèse du radical OH sur la molécule de n-butylbenzène est particulier. En dessous de 600 K, ces réactions favorisent la consommation du butylbenzène. Entre 600 et 700-720 K le coefficient de sensibilité des réactions R7279 (phc4h9 + oh = Bphc4h8 + h2o) et R7280 (phc4h9 + oh = Cphc4h8 + h2o) augmente jusqu'à devenir positif, indiquant que ces réactions ne favorisent plus l'oxydation du butylbenzène. Cette plage de température correspond à une zone de transition durant laquelle la consommation de ces radicaux phénylbutyles passe d'un mécanisme de peroxydation à un mécanisme d'oxydation (formation de phénylbutènes, dont les réactions ont un coefficient de sensibilité global positif). Au-delà de cette température, les voies d'oxydation commencent à perdre de leur importance et laissent place aux réactions de décomposition par β-scission: les coefficients de sensibilité des réactions de métathèse diminuent.

Les réactions R7278 (phc4h9 + oh = Dphc4h8 + h2o) et R7281 (phc4h9+oh = Aphc4h8+h2o) présentent le même comportement, mais l'augmentation du coefficient de sensibilité débute à plus haute température (650 K) et est moins marqué pour la réaction R7281. Par ailleurs, l'effet de la

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

réaction R7281 est lié à la réactivité du radical 1-phényl-4-butyle puisque très rapidement l'isomérisation de ce radical en 1-phényl-1-butyle devient prépondérante.

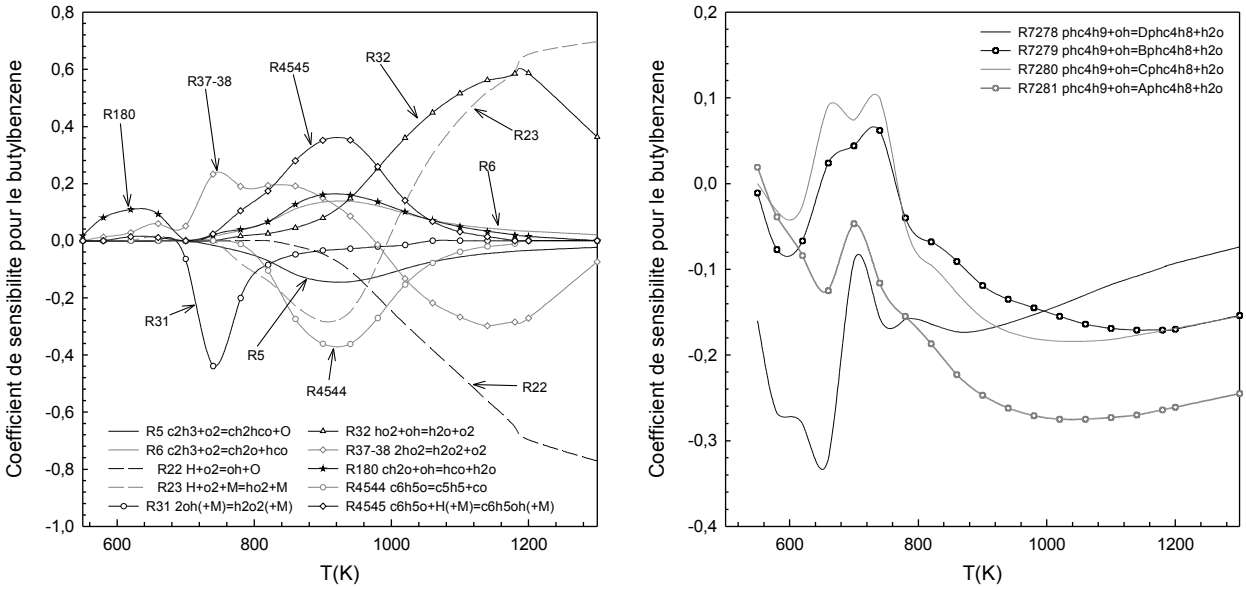


Figure V.48: Coefficients de sensibilité pour le butylbenzène lors de l'oxydation d'un mélange butylbenzène/oxygène/azote (P=10 atm, φ=0,25) en réacteur auto-agité

On observe que les réactions de la base C_0-C_2 ont le même impact sur l'oxydation du butylbenzène que lors de l'oxydation du décane et du propylcyclohexane: les réactions R31 (2 OH (+M) = H_2O_2 (+M)), R5 (C_2H_3 + O_2 = CH_2HCO + O) puis R22 (H + O_2 = OH + O) favorisent la consommation du butylbenzène alors que les réactions R180 (CH_2O + OH = HCO + H_2O) puis R6 (C_2H_3 + O_2 = CH_2O + HCO) la ralentissent. Les réactions R37-38 (2 HO_2 = H_2O_2 + O_2) et R23 (H + O_2 + M = HO_2 + M) ont toujours un effet variable selon la température et la réactivité de H_2O_2. Avant 950 K, le coefficient de sensibilité de la réaction R37-38 est positif puis négatif au-delà: c'est à cette température que la réaction de décomposition de H_2O_2 en 2 radicaux OH devient majoritaire.

Parmi les réactions les plus influentes sur la consommation du butylbenzène, on trouve celles faisant intervenir le radical phénoxy C_6H_5O et en particulier les réactions R4544 (C_6H_5O=C_5H_5+CO) et R4545 (C_6H_5O + H (+M)=C_6H_5OH (+M)). Ces 2 réactions sont celles présentant les coefficients de sensibilité les plus importants entre 800 et 950K, et ont des effets opposés. La réaction R4545 a en effet un effet inhibiteur très marqué, qui se comprend par le fait qu'elle consomme un atome d'hydrogène très réactif pour former une molécule de phénol. A l'inverse, la réaction R4544 détruit

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

un radical stable (C_6H_5O) et permet de rompre un cycle de réactions ($C_6H_5O \rightarrow C_6H_5OH \rightarrow C_6H_5O$) fortement consommateur de radicaux (OH, H, HO_2).

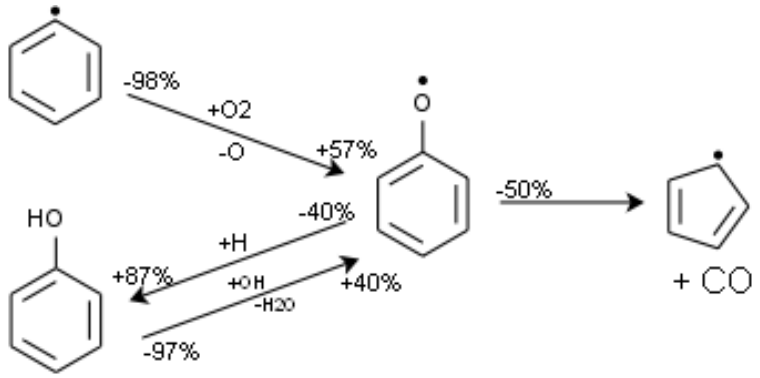


Figure V.49: Réactions du phénol et du radical phénoxy à 920 K lors de l'oxydation d'un mélange butylbenzène/oxygène/azote (P=10 atm, φ=0,25) en réacteur auto-agité

4.4 Simulation en réacteur à écoulement

Nous avons tenté de modéliser grâce à notre modèle les données obtenues par Brezinsky *et al* [58] lors de leur étude de l'oxydation d'un mélange stœchiométrique (φ=0,985) butylbenzène/ oxygène/azote en réacteur à écoulement. La comparaison entre résultats expérimentaux et simulés est présentée sur la figure V.50.

On s'aperçoit que le modèle est en très bon accord avec l'expérience pour les réactifs et les espèces majoritaires: styrène et éthylène. Par contre il sous-estime fortement la concentration des espèces oxygénées (phénol, benzaldéhyde, CO) ainsi que celle du toluène. L'écart important observé dans le cas de l'éthylbenzène peut s'expliquer par des valeurs expérimentales trop élevées suite à la recombinaison des radicaux benzyles et méthyles lors des prélèvements, hypothèse qui se justifie par les fortes teneurs en dibenzyle observées par Brezinsky *et al*. Le propène est également surestimé ainsi que, dans une moindre mesure, le benzène, l'acétylène et le propénylbenzène.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

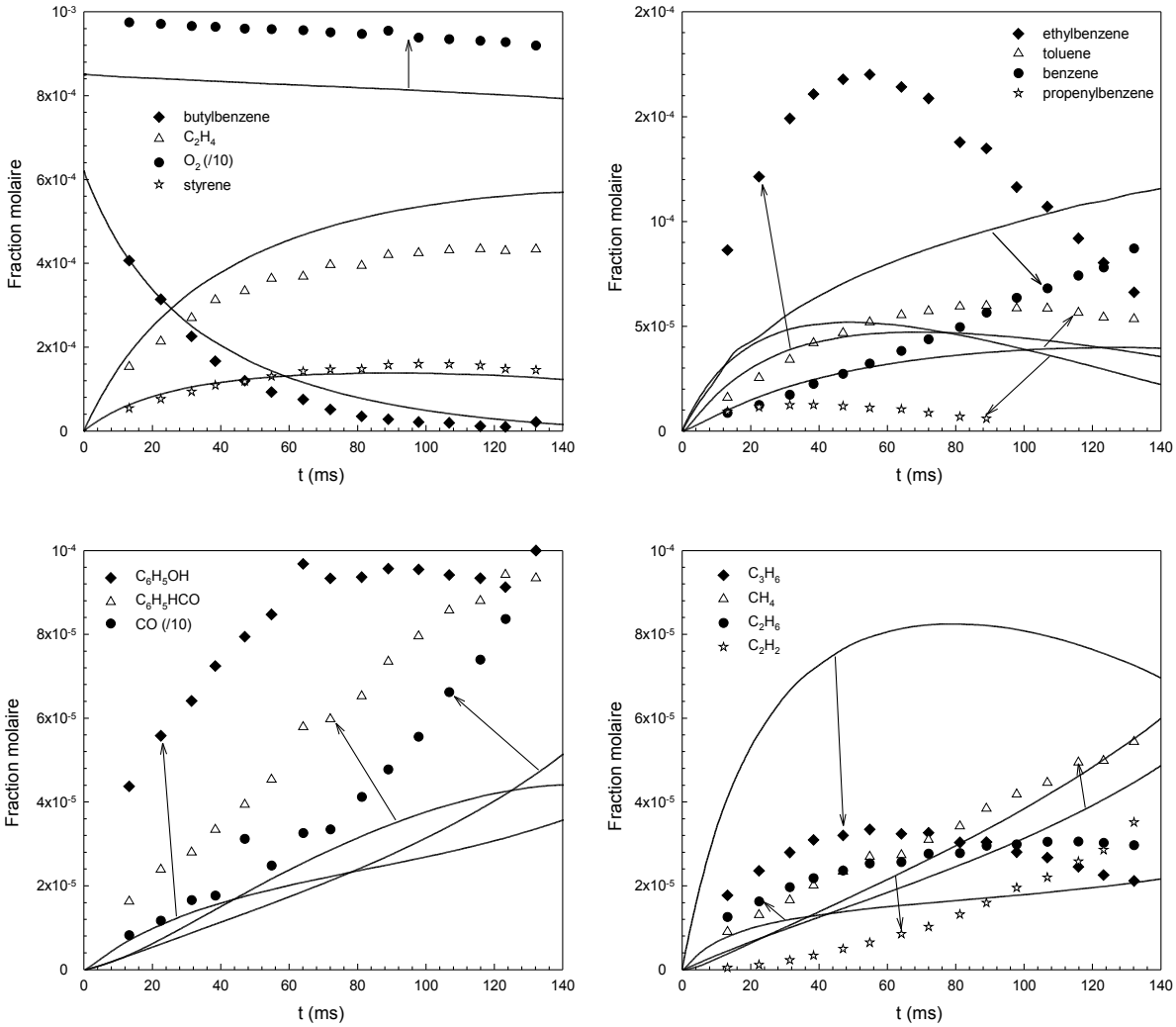


Figure V.50: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du n-butylbenzène en réacteur à écoulement à 1 atm (620ppm de $C_{10}H_{14}$ et 8500 ppm de O_2 ; φ=0,985)

5. Oxydation des mélanges binaires et ternaire

5.1 Élaboration du mécanisme global - Réactions d'interaction

Le mécanisme final utilisé pour la modélisation de l'oxydation des mélanges d'hydrocarbures étudiés a été obtenu en regroupant les 3 sous-mécanismes développés pour les hydrocarbures purs. En l'état, ce mécanisme considère que les seules interactions possibles entre les mécanismes d'oxydation de ces 3 hydrocarbures ont lieu via le réservoir de radicaux communs.

Nous avons par conséquent introduit de nouvelles réactions permettant de relier ces différents mécanismes. Ces réactions font intervenir des espèces lourdes qui ont conservé la structure initiale du réactif. Elles se classent selon 4 catégories:

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

- les réactions de métathèse croisées entre les hydrocarbures initiaux (RH et R'H) et les radicaux alkyles (R et R') qui en dérivent:

$$RH + R' \leftrightarrows R + R'H$$

- les réactions de métathèse entre les hydrocarbures initiaux (RH et R'H) et les radicaux peroxyalkyles (RO_2 et $R'O_2$)

$$RH + R'O_2 \leftrightarrows R + R'O_2H$$

$$RO_2 + R'H \leftrightarrows RO_2H + R'$$

- les réactions entre les radicaux peroxyalkyles (RO_2 et $R'O_2$) et alkyles (R et R')

$$R + R'O_2 \rightarrow RO + R'O$$

$$RO_2 + R' \rightarrow RO + R'O$$

- les réactions de dismutation entre les radicaux peroxyalkyles (RO_2 et $R'O_2$)

$$RO_2 + R'O_2 \rightarrow RO + R'O$$

Les paramètres cinétiques de ces réactions ont été estimés par analogie avec des réactions équivalentes: analogie avec les réactions de métathèse avec les radicaux propyles pour la 1ère catégorie, analogie avec les réactions de métathèse avec les radicaux peroxyméthyles pour la 2ème catégorie et utilisation des valeurs $k = 1{,}9.10^{12}.\exp(1200/RT)$ et $k = 1.10^{11}$ pour les 3ème et 4ème catégories respectivement.

Le modèle ainsi écrit a été utilisé pour modéliser l'oxydation en réacteur auto-agité des 3 mélanges étudiés et dont les résultats ont été présentés au chapitre IV.

5.2 Oxydation du mélange n-décane/n-propylcyclohexane 60/40 (mole/mole)

a) confrontation modèle-expérience

Les comparaisons entre les profils expérimentaux et simulés des réactifs et produits d'oxydation du mélange décane/propylcyclohexane 60/40 (mole/mole) sont présentées sur les figures V.51 à V.53.

On constate que le modèle surestime la consommation des 2 réactifs hydrocarbonés, surtout celle du propylcyclohexane. Les profils des espèces légères (C_0-C_4) sont relativement bien prédits, et l'accord est d'autant meilleur que la richesse est faible. Les principaux aldéhydes (méthanal, éthanal) sont sous-estimés par le modèle. Les profils des composés cycliques sont très mal simulés par le modèle, excepté ceux du benzène et du méthylènecyclohexane.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

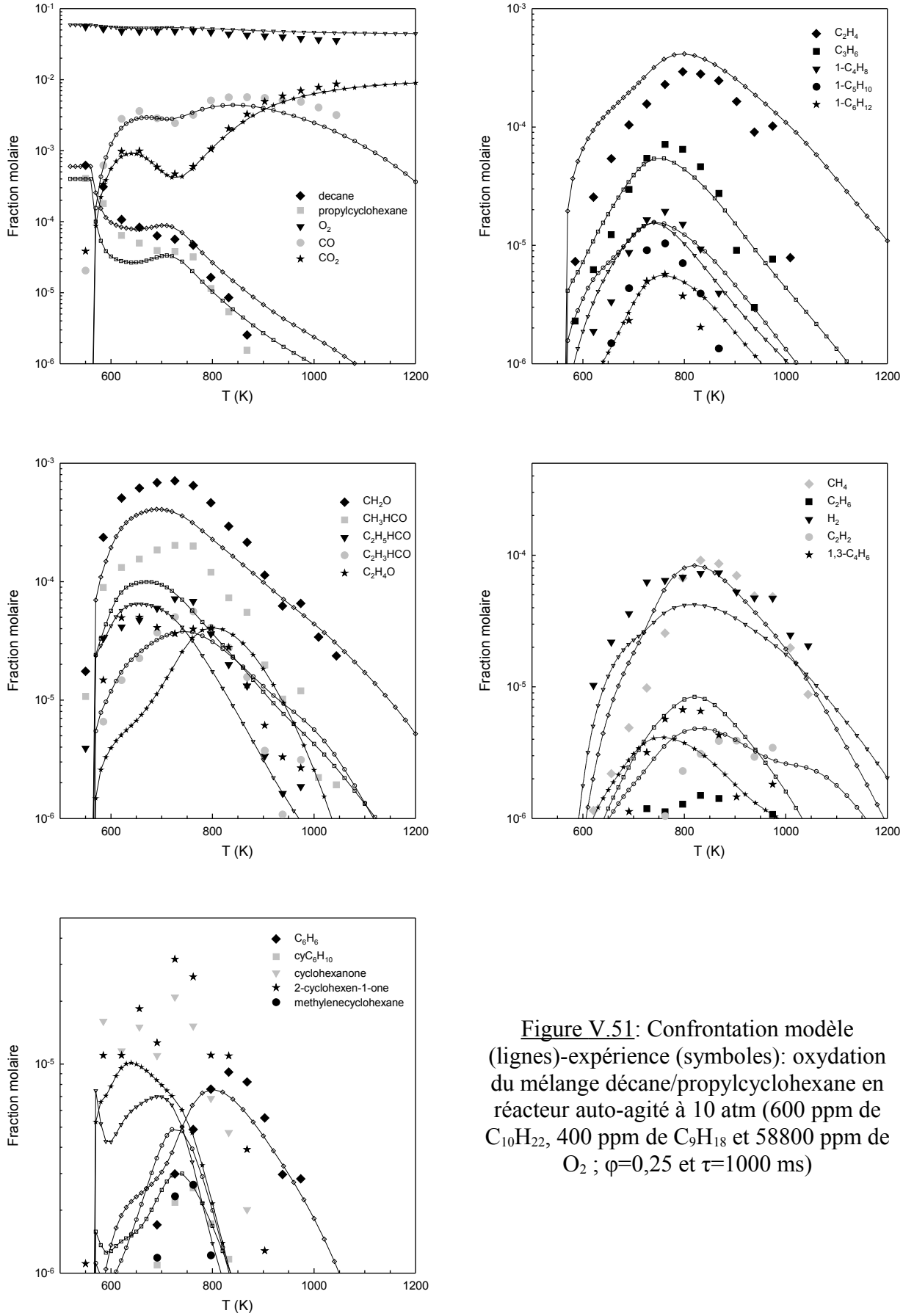


Figure V.51: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du mélange décane/propylcyclohexane en réacteur auto-agité à 10 atm (600 ppm de $C_{10}H_{22}$, 400 ppm de C_9H_{18} et 58800 ppm de O_2 ; φ=0,25 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

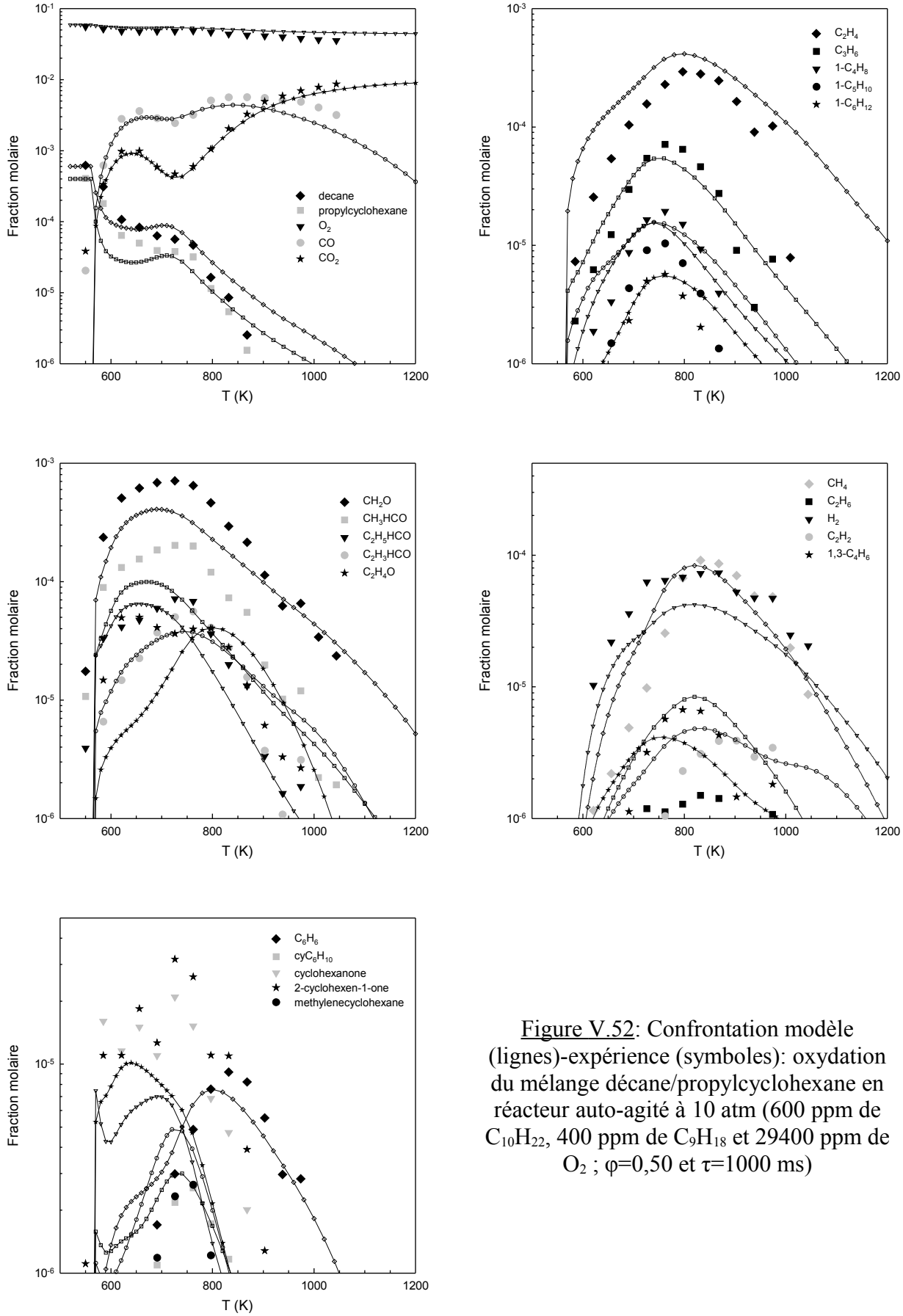


Figure V.52: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du mélange décane/propylcyclohexane en réacteur auto-agité à 10 atm (600 ppm de $C_{10}H_{22}$, 400 ppm de C_9H_{18} et 29400 ppm de O_2 ; φ=0,50 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

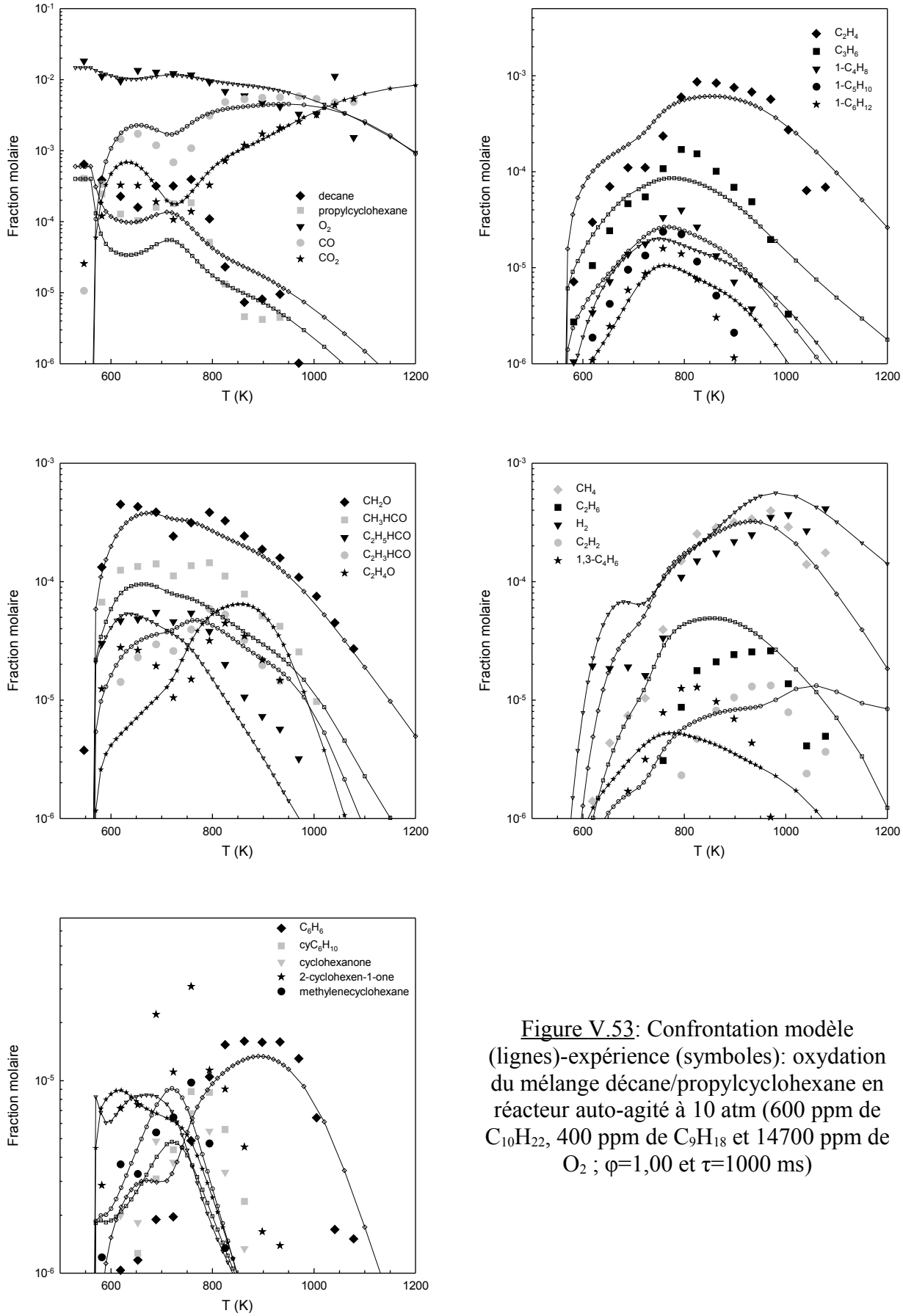


Figure V.53: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du mélange décane/propylcyclohexane en réacteur auto-agité à 10 atm (600 ppm de $C_{10}H_{22}$, 400 ppm de C_9H_{18} et 14700 ppm de O_2 ; φ=1,00 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

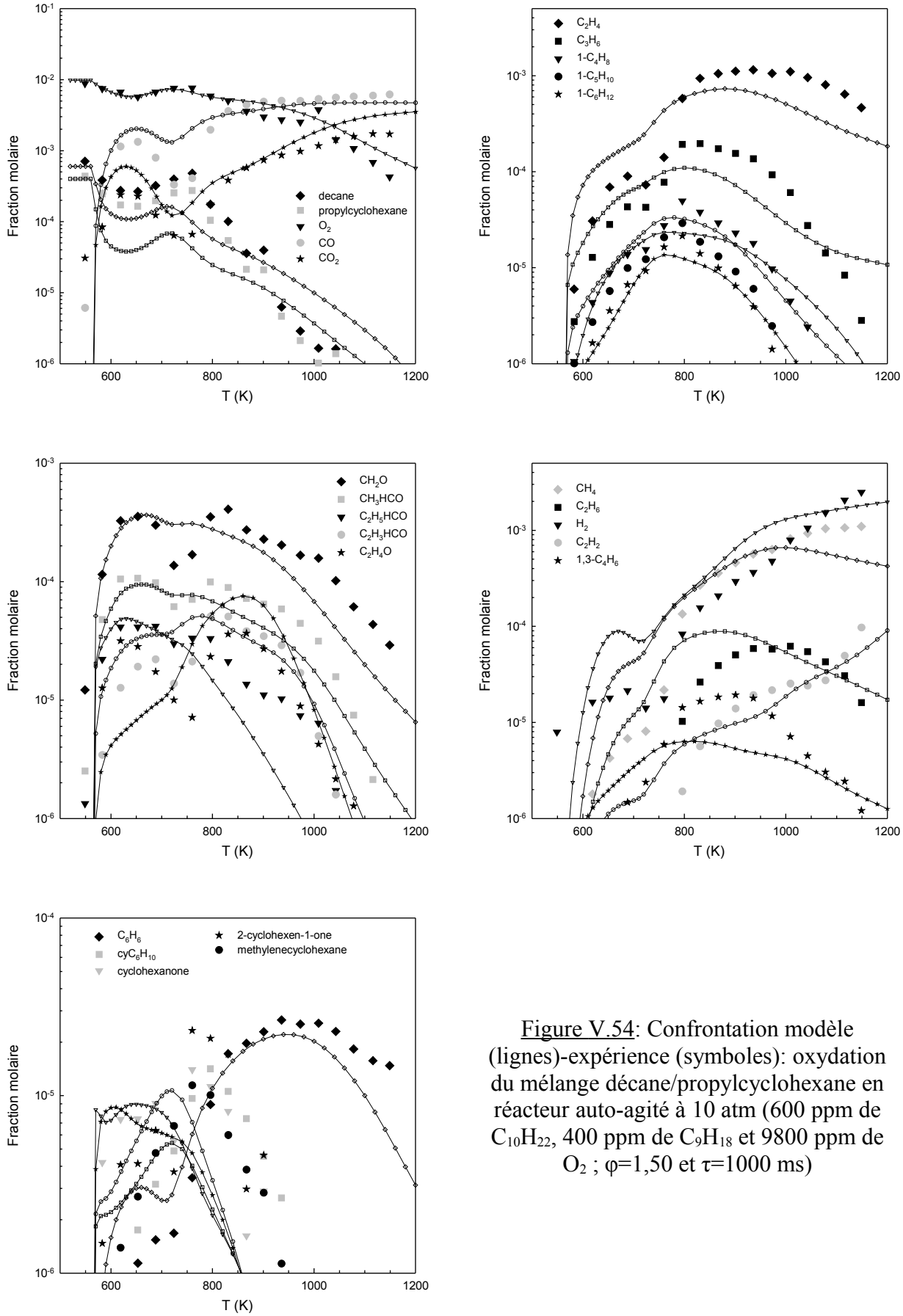


Figure V.54: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du mélange décane/propylcyclohexane en réacteur auto-agité à 10 atm (600 ppm de $C_{10}H_{22}$, 400 ppm de C_9H_{18} et 9800 ppm de O_2 ; φ=1,50 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

b) *Analyse de voies réactionnelles*

Comme lors de la modélisation des composés purs, nous avons effectué une analyse de vitesse en milieu pauvre et à haute pression pour déterminer les principales voies de dégradation des 2 hydrocarbures initiaux.

On constate que quelle que soit la température, les voies réactionnelles mises en jeu lors de la dégradation des 2 hydrocarbures et des radicaux dérivés sont identiques à celles mises en évidence lors de l'oxydation de ces composés purs. De plus, l'importance relative de ces voies réactionnelles reste inchangée. On remarque également que les réactions d'interaction décrites précédemment ont un rôle négligeable: les interactions entre les mécanismes primaires des 2 réactifs se limitent donc aux espèces de faible taille.

c) *Analyse de sensibilité.*

Nous avons effectué une analyse de sensibilité sur les espèces n-décane et n-propylcyclohexane. Les résultats de cette analyse sont présentés sur la figure V.52. Sur cette figure sont indiqués les coefficients de sensibilité des réactions les plus sensibles pour 3 températures (650, 850 et 1050 K).

On remarque que les réactions les plus sensibles sont les mêmes que celles déterminées lors de l'oxydation des composés seuls. Ces réactions appartiennent à la base C_0-C_2, et leur influence est sensiblement la même sur les 2 hydrocarbures avec néanmoins un effet légèrement plus important sur le propylcyclohexane. La réaction R37-R38 ($HO_2 + HO_2 = H_2O_2 + O_2$) présente un comportement particulier (figure V.52): le profil du coefficient de sensibilité en fonction de la température est décalé entre les 2 hydrocarbures. Ce coefficient devient négatif à des températures légèrement plus faibles pour le propylcyclohexane. De plus, dès 680 K, il revêt des valeurs toujours plus faibles pour le cyclane que pour l'alcane (S_{C10H22}=-0,320 contre S_{C9H18}=-0,350 à 1150 K, S_{C10H22}=0,180 contre S_{C9H18}=0,140 à 740 K)

Concernant l'influence des mécanismes primaires d'oxydation des 2 hydrocarbures sur leur partenaire, elle est très peu marquée. Néanmoins elle est la plus importante dans la plage de température 580-650 K, ce qui correspond à la flamme froide et à la zone dans laquelle les effets du partenaire sur la vitesse de consommation des réactifs s'étaient révélés les plus intenses (chapitre IV).

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

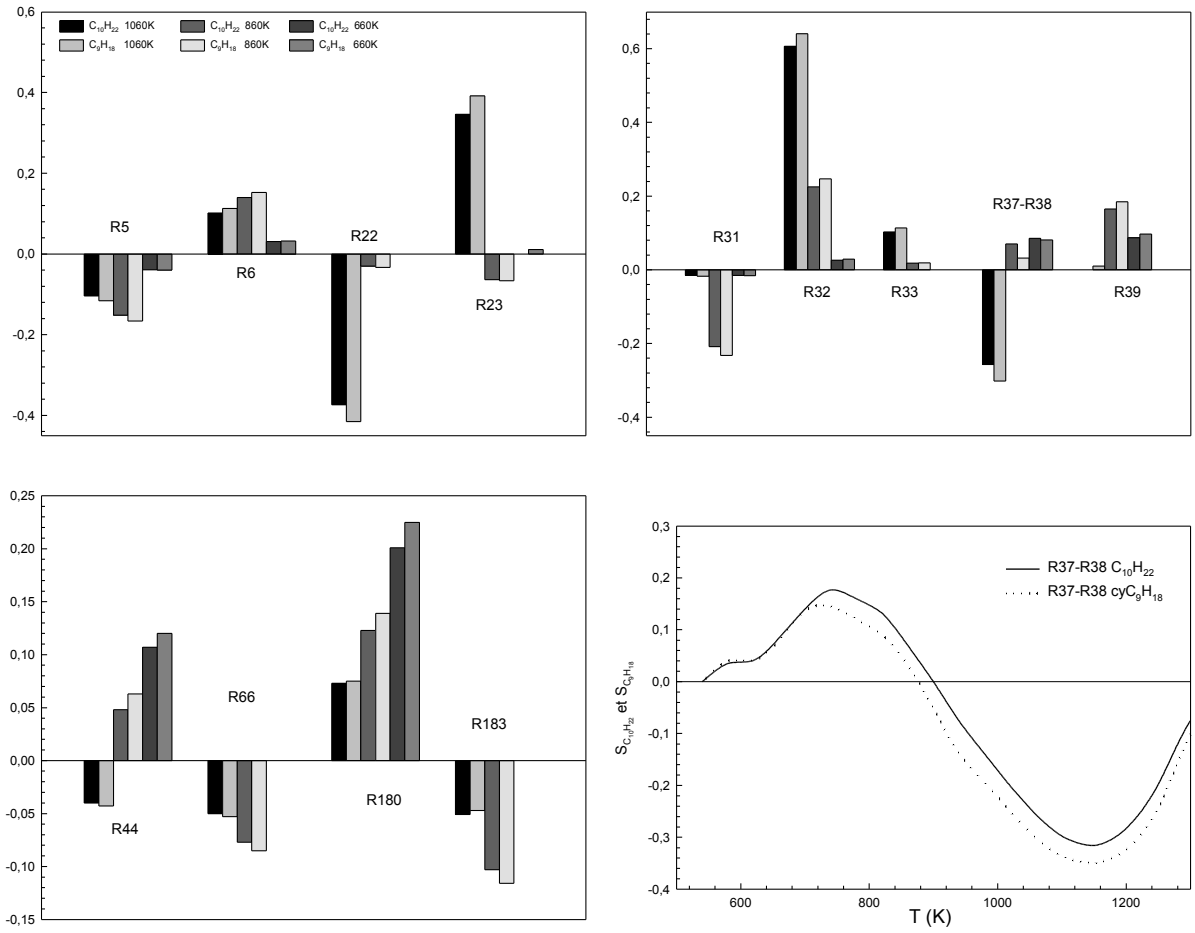


Figure V.55: Analyse de sensibilité pour le n-décane et le n-propylcyclohexane lors de l'oxydation du mélange binaire n-décane/ n-propylcyclohexane en réacteur auto-agité à 10 atm et φ=0,25

5.3 *Oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène 60/40 (mole/mole)*

Lors du paragraphe V.2.2.c (page 184), nous avions indiqué que les constantes de vitesse utilisées pour les réactions d'addition des radicaux décyles avec l'oxygène étaient celles générées initialement par Exgas et non celles proposées par DeSain *et al* [10]. En effet l'utilisation des constantes de DeSain *et al* entraînait, pour ce mélange binaire, un coefficient négatif de température trop intense (absence de consommation du décane entre 670 et 700 K) sur le profil de décane. L'utilisation des paramètres cinétiques proposés par Exgas a permis de résoudre ce problème, et ont donc été conservés.

a) Confrontation modèle-expérience

Le modèle obtenu par regroupement des différents sous-mécanismes et ajout des réactions d'interaction a également permis de modéliser l'oxydation du mélange binaire n-décane/

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

n-butylbenzène en réacteur auto-agité. La comparaison entre les profils expérimentaux et simulés est présentée sur les figures V.49 à V.47.

Globalement le modèle représente correctement les résultats expérimentaux. Cependant comme lors de toutes les simulations précédentes en réacteur auto-agité, le modèle sous-estime la quantité de CO formé. Les différents alcènes linéaires sont correctement prédits par le modèle, même si, en milieu riche, les concentrations prédites sont moins élevées que celles détectées expérimentalement. A l'inverse, on constate que lorsque la richesse augmente, l'accord entre le modèle et l'expérience s'améliore pour les aldéhydes de petite taille (CH_2O, CH_3HCO)

b) Analyse de voies réactionnelles

Comme précédemment, une analyse de vitesse a été menée pour déterminer les voies de dégradation majoritaires des 2 hydrocarbures constitutifs du mélange. Cette analyse montre que ces voies sont identiques à celles empruntées lors de l'oxydation de ces composés purs. Ainsi, quelle que soit la température, le n-décane et le n-butylbenzène sont principalement consommés par les réactions de métathèse avec le radical OH. Les radicaux alkyles résultant réagissent ensuite par des réactions de rupture de liaisons (C−C et C−H) et d'oxydation à haute température, alors qu'ils s'additionnent préférentiellement avec l'oxygène à basse température. Une vue plus détaillée de ces voies de dégradation est représentée sur les figures V.9 à V.30 pour le n-décane et V.15 à V.5 pour le n-butylbenzène. De plus, comme lors du mélange n-décane/n-propylcyclohexane, les réactions d'interaction entre les 2 mécanismes primaires ont une très faible importance.

c) Analyse de sensibilité

Nous avons effectué une analyse de sensibilité pour une richesse de 0,25 et avons ainsi pu déterminer les réactions les plus influentes sur la consommation du décane et du butylbenzène. Les résultats de cette analyse sont présentés sur la figure V.45 pour 3 températures différentes.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

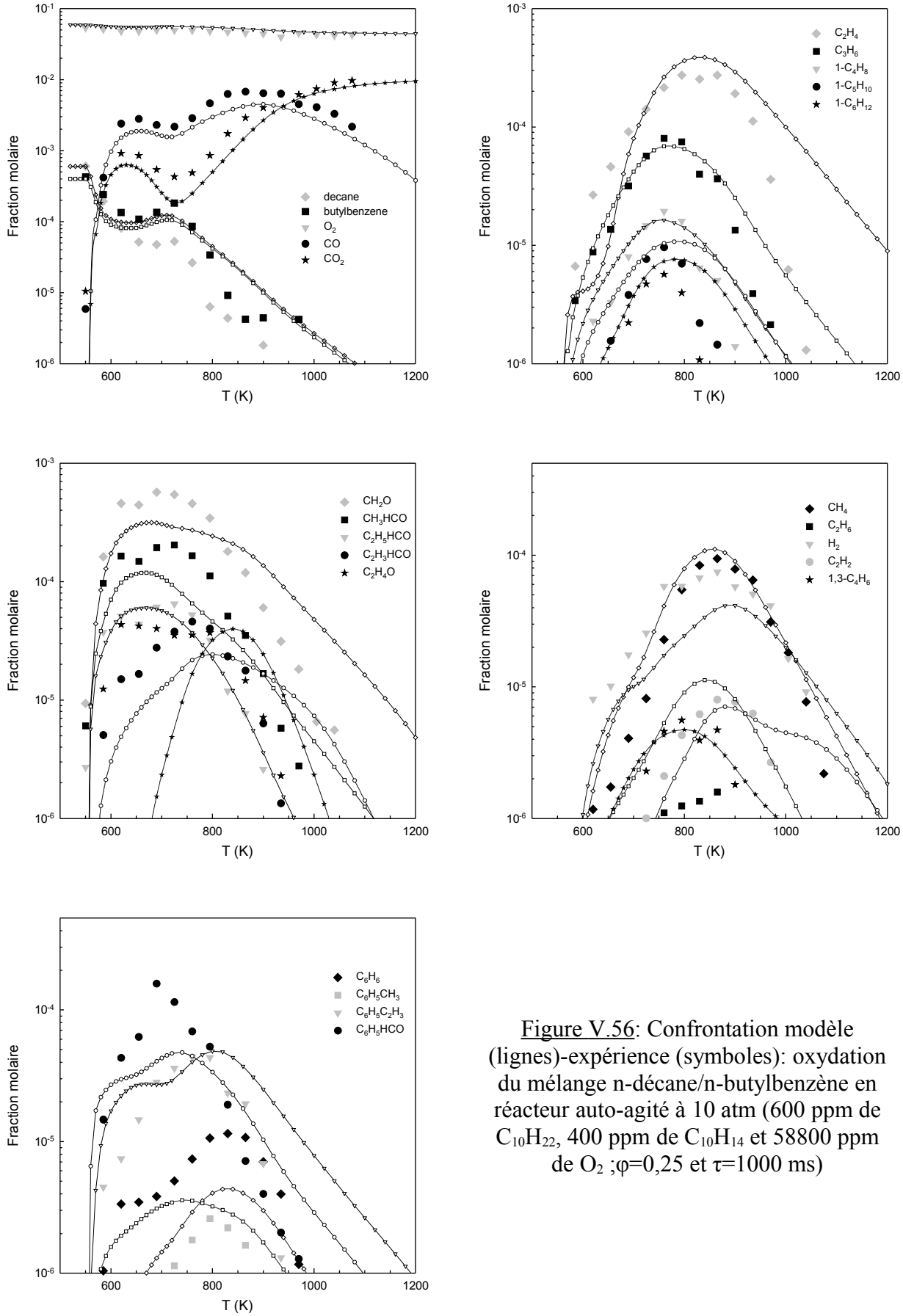


Figure V.56: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène en réacteur auto-agité à 10 atm (600 ppm de $C_{10}H_{22}$, 400 ppm de $C_{10}H_{14}$ et 58800 ppm de O_2 ;φ=0,25 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

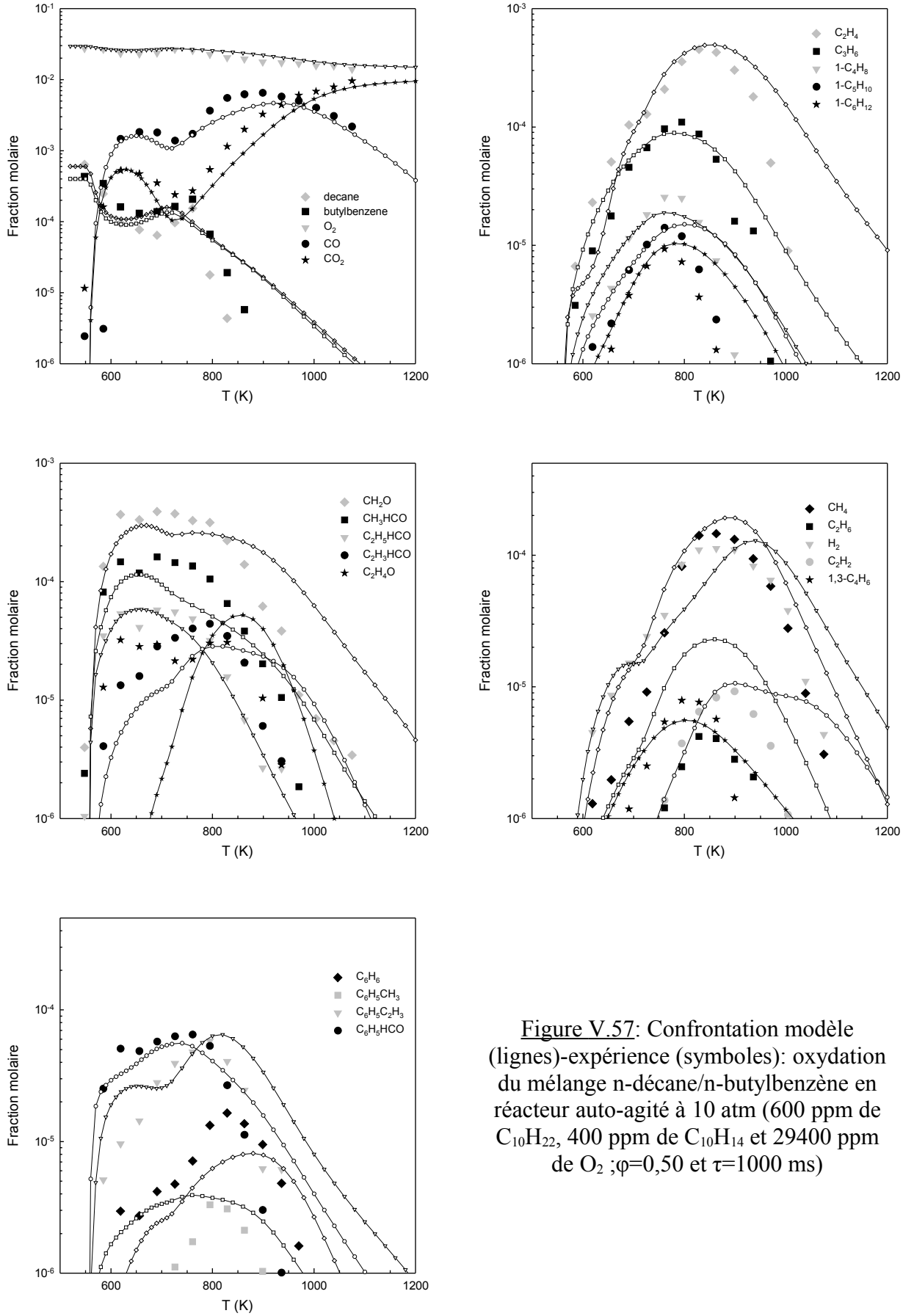


Figure V.57: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène en réacteur auto-agité à 10 atm (600 ppm de $C_{10}H_{22}$, 400 ppm de $C_{10}H_{14}$ et 29400 ppm de O_2 ;φ=0,50 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

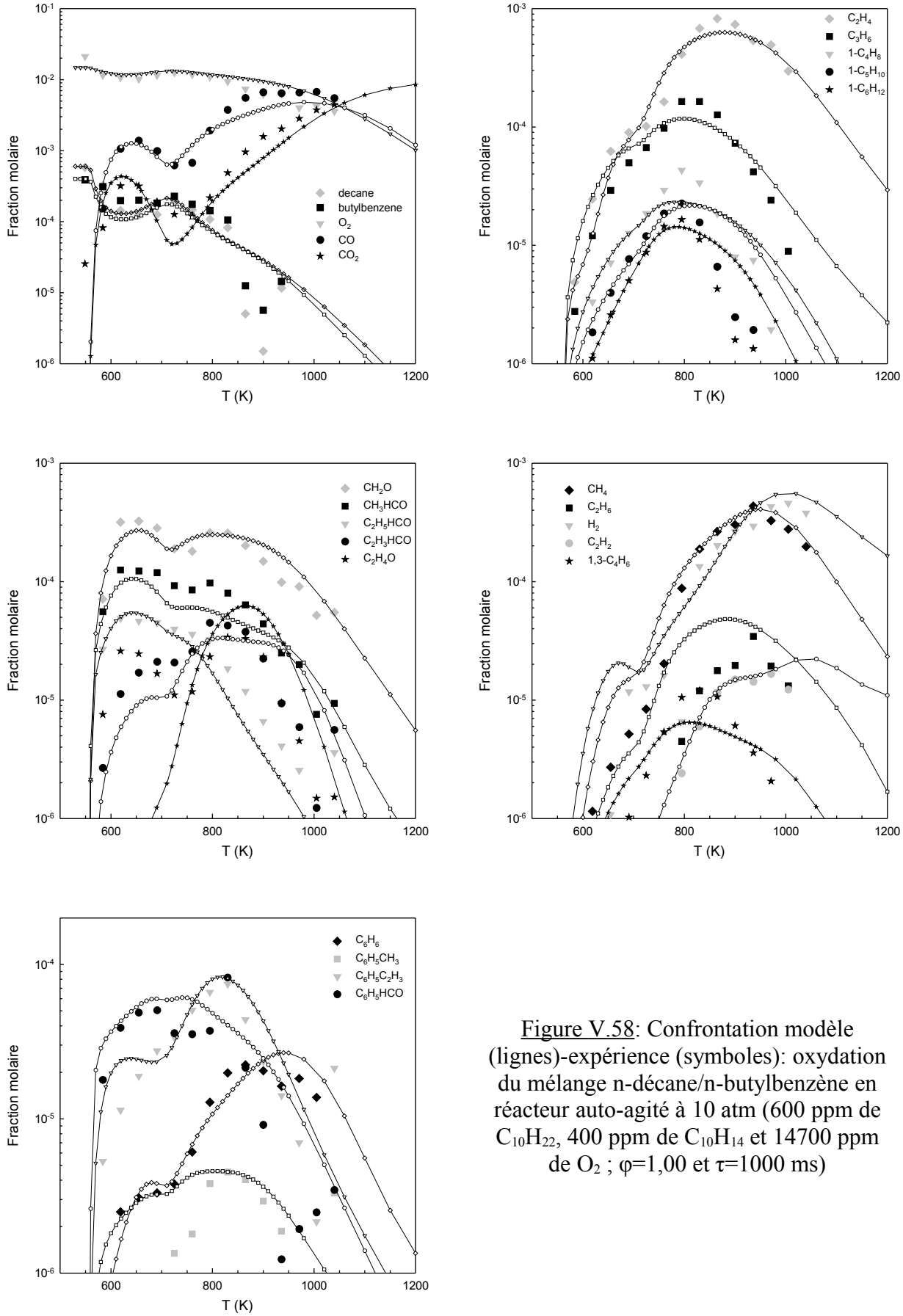


Figure V.58: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène en réacteur auto-agité à 10 atm (600 ppm de $C_{10}H_{22}$, 400 ppm de $C_{10}H_{14}$ et 14700 ppm de O_2 ; φ=1,00 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

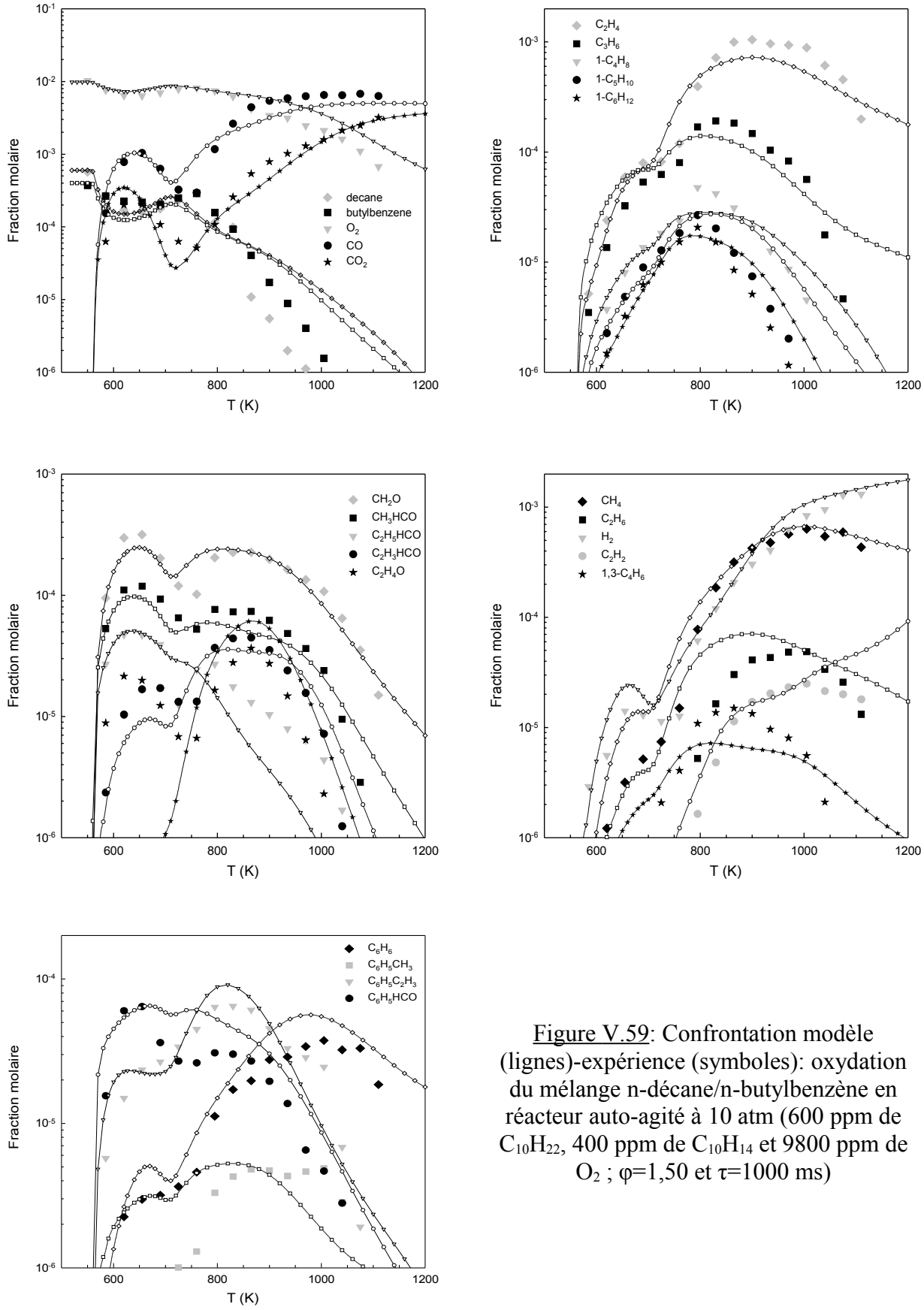


Figure V.59: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène en réacteur auto-agité à 10 atm (600 ppm de $C_{10}H_{22}$, 400 ppm de $C_{10}H_{14}$ et 9800 ppm de O_2 ; φ=1,50 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

On constate que le décane et le butylbenzène sont sensibles aux mêmes réactions, essentiellement celles de la base C_0-C_2. Cette sensibilité est équivalente pour les 2 réactifs, avec toutefois un impact légèrement plus important de ces réactions sur l'oxydation du butylbenzène. Comme lors de l'étude du mélange n-décane/n-propylcyclohexane, on observe un décalage sur les profils du coefficient de sensibilité de la réaction R37-R38: celui-ci est toujours plus faible pour la consommation du propylcyclohexane et devient négatif à des températures plus basses (S_{C10H22}=-0,300 contre S_{C9H18}=-0,330 à 1160 K, S_{C10H22}=0,195 contre S_{C9H18}=0,150 à 740 K).

En présence de butylbenzène, l'oxydation du décane se révèle être aussi sensible que celle du butylbenzène au radical phénoxy C_6H_5O et à ses voies de dégradation. Par contre l'oxydation de ces 2 hydrocarbures est très peu sensible au mécanisme d'oxydation primaire de leur partenaire.

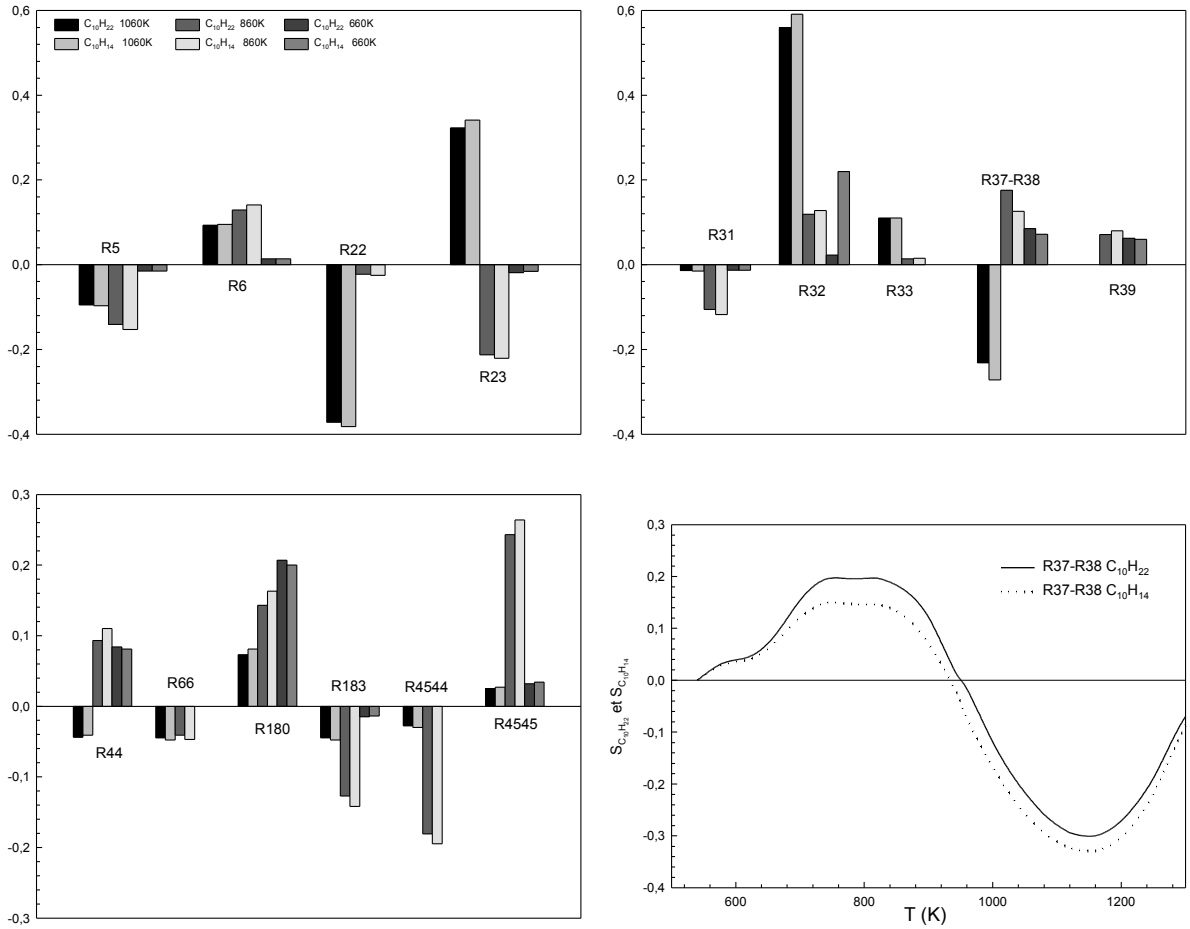


Figure V.60: Analyse de sensibilité pour le n-décane et le n-butylbenzène lors de l'oxydation du mélange binaire n-décane/n- butylbenzène en réacteur auto-agité à 10 atm et φ=0,25

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

5.4 Oxydation du mélange ternaire

a) Confrontation modèle-expérience

Le mécanisme élaboré pendant cette thèse a enfin été utilisé pour simuler l'oxydation du mélange ternaire n-décane/n-propylcyclohexane/n-butylbenzène 40/30/30 (mole/mole/mole). La confrontation entre les profils expérimentaux et simulés est présentée sur les figures V.33 à V.11.

On observe un accord global correct entre les profils modélisés et expérimentaux. Néanmoins le modèle sous-estime la production de CO au-delà de 800 K. Au-dessus de cette température, les 3 hydrocarbures du mélange initial ne sont pas consommés assez rapidement alors qu'ils sont généralement surconsommés à basse température.

Les concentrations des différents 1-alcènes sont bien reproduites par le modèle même si on constate une légère surestimation du pent-1-ène. Concernant les aldéhydes, on observe un meilleur accord pour les richesses les plus élevées. Cependant la concentration de l'acétadéhyde est systématiquement sous-estimée. Quant aux espèces cycliques, les profils des hydrocarbures aromatiques sont bien mieux reproduits que ceux des espèces naphténiques qui apparaissent trop tôt lors des simulations.

Globalement, les désaccords observés entre les expériences et les simulations sont identiques à ceux rencontrés à la fois lors de l'oxydation des composés purs et lors de l'oxydation des mélanges binaires.

b) Analyse de voies réactionnelles

Comme lors des simulations précédentes en réacteur auto-agité, nous avons effectué une analyse de voies réactionnelles pour l'oxydation du mélange ternaire n-décane/ n-propylcyclohexane/n-butylbenzène 40/30/30 (mole/mole/mole) à 10 atm et en milieu pauvre (φ=0,25).

A haute température, les 3 réactifs sont consommés par métathèse, principalement (80%) par le radical OH, pour former les radicaux alkyles associés. Les radicaux décyles réagissent ensuite majoritairement par décomposition pour former des 1-alcènes et des radicaux alkyles de taille inférieure. Les radicaux phénylbutyles sont également consommés essentiellement par des réactions de β-scission C−C, excepté le radical 1-phényl-4-butyle qui s'isomérise quasi-totalement en radical 1-phényl-1-butyle. Les radicaux propylcyclohexyles se comportent différemment: les réactions d'isomérisation et de rupture de liaison C−H sont majoritaires et les oléfines conjuguées

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

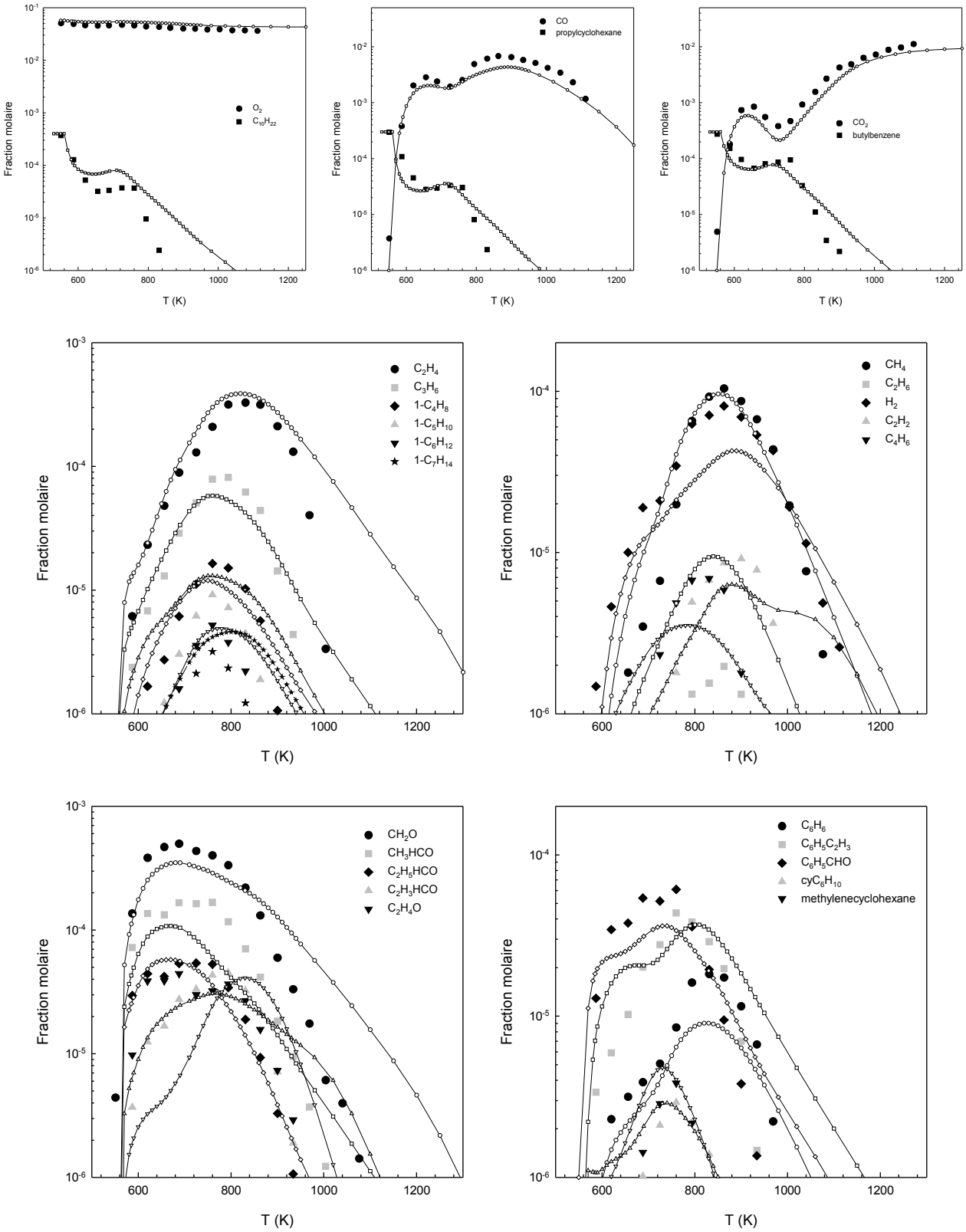


Figure V.61: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène/n-propylcyclohexane en réacteur auto-agité à 10 atm (400 ppm de $C_{10}H_{22}$, 300 ppm de $C_{10}H_{14}$, 300 ppm de C_9H_{18} et 57200 ppm de O_2 ; φ=0,25 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

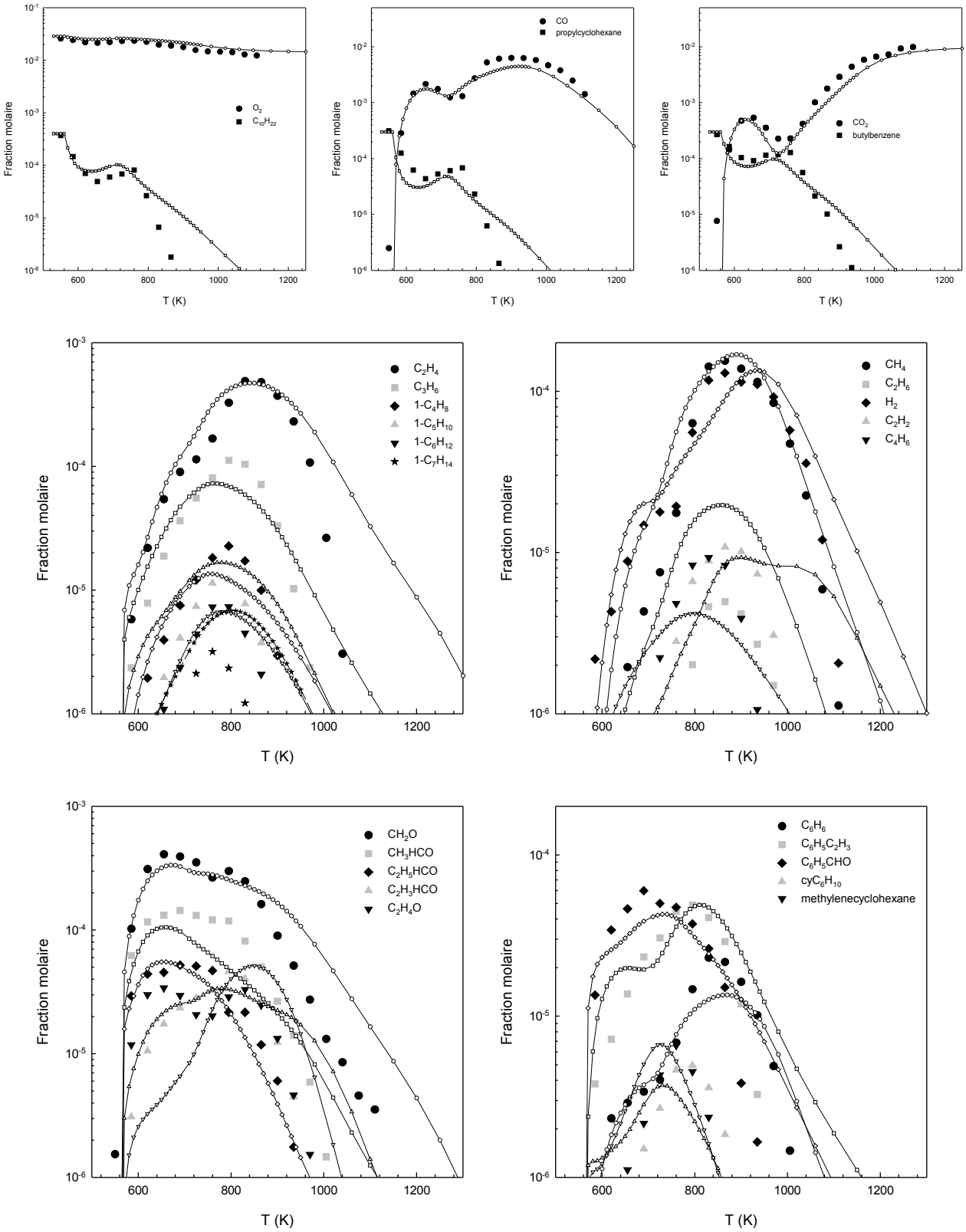


Figure V.62: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène/n-propylcyclohexane en réacteur auto-agité à 10 atm (400 ppm de $C_{10}H_{22}$, 300 ppm de $C_{10}H_{14}$, 300 ppm de C_9H_{18} et 28600 ppm de O_2 ; φ=0,50 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

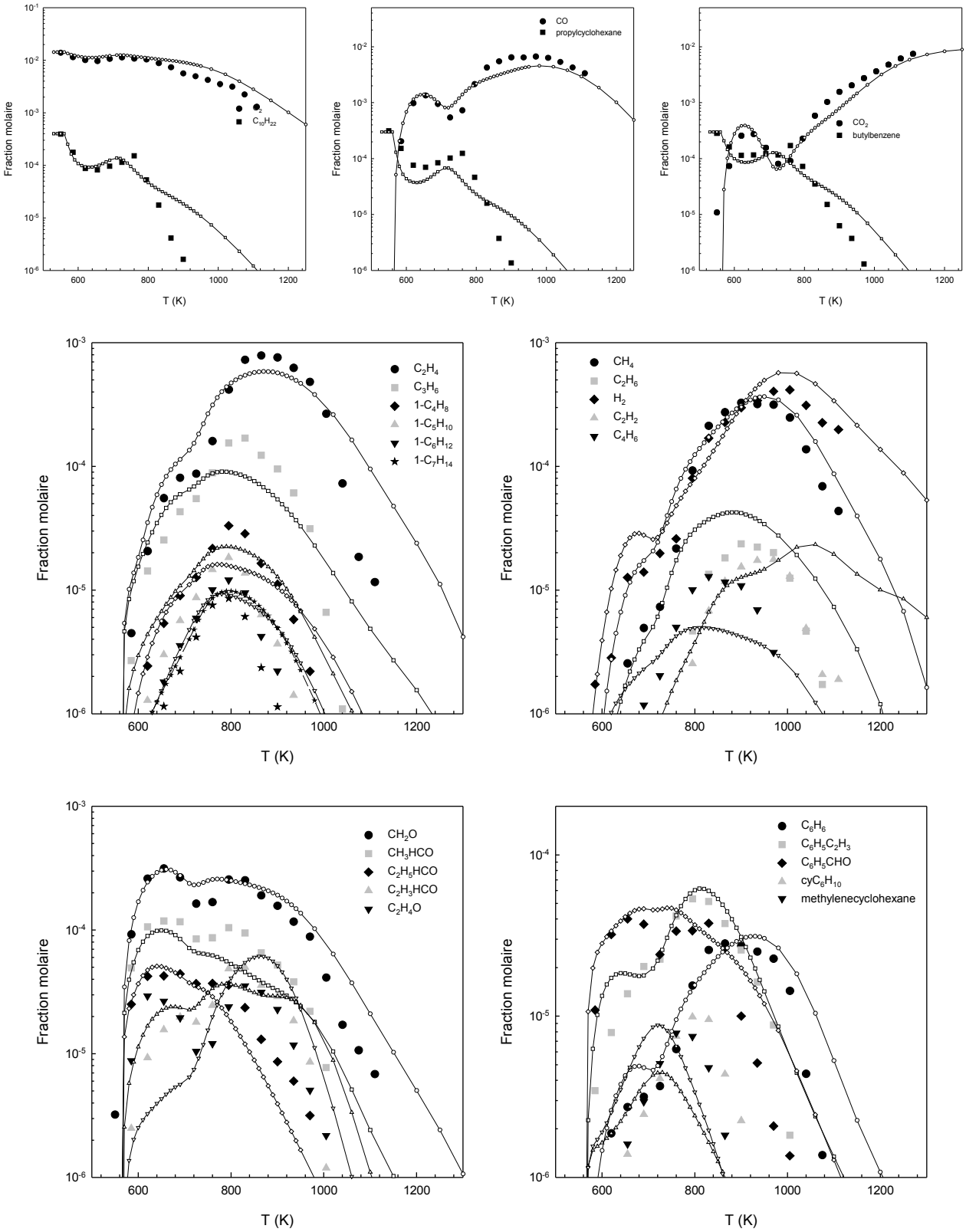


Figure V.63: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène/n-propylcyclohexane en réacteur auto-agité à 10 atm (400 ppm de $C_{10}H_{22}$, 300 ppm de $C_{10}H_{14}$, 300 ppm de C_9H_{18} et 14300 ppm de O_2 ; φ=1,00 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

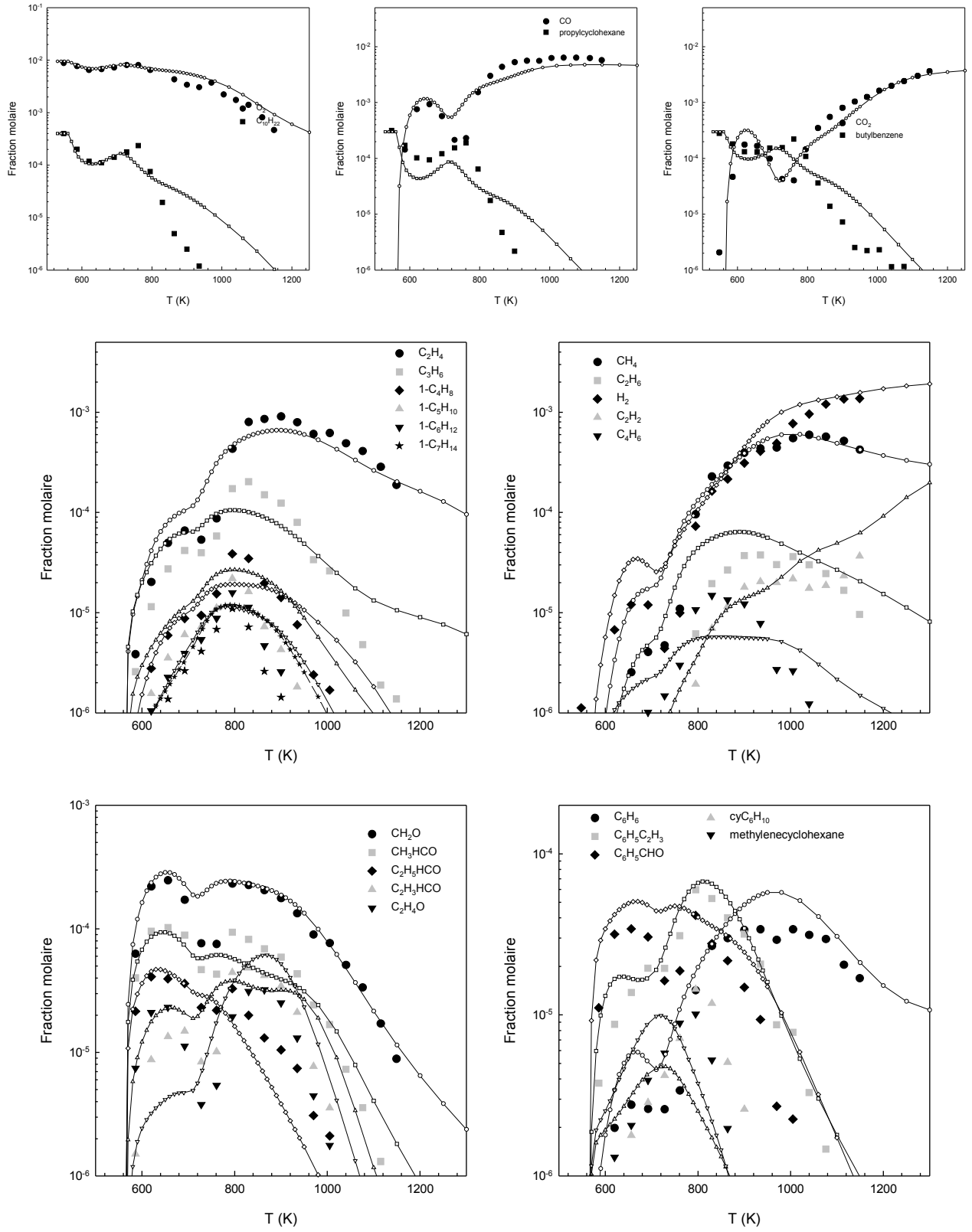


Figure V.64: Confrontation modèle (lignes)-expérience (symboles): oxydation du mélange n-décane/n-butylbenzène/n-propylcyclohexane en réacteur auto-agité à 10 atm (400 ppm de $C_{10}H_{22}$, 300 ppm de $C_{10}H_{14}$, 300 ppm de C_9H_{18} et 9533 ppm de O_2 ; φ=1,50 et τ=1000 ms)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

sont par conséquent les produits de dégradation majoritaire. Ces oléfines réagissent ensuite soit par métathèse pour former un radical allylique, qui se décompose ensuite par β-scission, soit par décomposition suite à l'attaque du radical OH, formant un aldéhyde et un radical alkyle. Pour chacun des hydrocarbures initiaux, ce schéma de dégradation correspond à celui rencontré lors de leur oxydation isolé, à la fois au niveau des voies mises en jeu mais également dans les importances relatives de ces voies.

A basse température, ce sont les réactions d'addition des radicaux alkyles avec l'oxygène qui prédominent. Les radicaux peroxyalkyles formés réagissent alors essentiellement par isomérisation interne, générant des radicaux hydroperoxyalkyles. Ces radicaux vont alors soit se décomposer en éthers cycliques, oléfines conjuguées ou aldéhydes + alcènes libérant au passage un radical OH ou HO_2, soit fixer à nouveau une molécule d'oxygène. Après cette deuxième addition, le radical obtenu s'isomérise puis se décompose pour former des aldéhydes et des radicaux oxoalkyles en générant 2 radicaux OH.

On peut ainsi remarquer que les voies de dégradation mises en jeu dans ce mélange sont à nouveau, comme dans les mélanges binaires, identiques, qualitativement et quantitativement, à celles observées lors de l'oxydation des 3 composés seuls. Les schémas présentés sur les figures V.9 à V.30 pour le n-décane, V.28,V.27 et V.22 pour le n-propylcyclohexane et V.15 à V.5 pour le n-butylbenzène sont donc applicable à ce mélange ternaire.

c) Analyses de sensibilité

Nous avons également réalisé une analyse de sensibilité pour les 3 hydrocarbures en milieu pauvre (φ=0,25). Les résultats sont représentés sur la figure V.31.

On observe pour ce mélange ternaire le même comportement que celui des 2 mélanges binaires, à savoir que l'oxydation des 3 hydrocarbures est sensible aux mêmes réactions, essentiellement celles de la base C_0-C_2. De plus, les coefficients de sensibilité associées à ces réactions sont très proches pour les 3 composés.

C'est aux plus basses températures que l'oxydation de chacun des 3 hydrocarbures est le plus sensible à son mécanisme primaire. L'influence des mécanismes des 2 autres hydrocarbures est également maximale à ces plus basses températures, mais reste tout de même faible.

On remarque également que la réaction R37-R38 exerce la même influence sur l'oxydation du n-propylcyclohexane et du n-butylbenzène et qui est différente de celle exercée sur le n-décane. En

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

effet, on s'aperçoit que cette réaction est plus défavorable à la consommation du décane que celles des 2 autres hydrocarbures à basse température, et la favorise (coefficient de sensibilité négatif) bien plus tard (960 K contre 920 K).

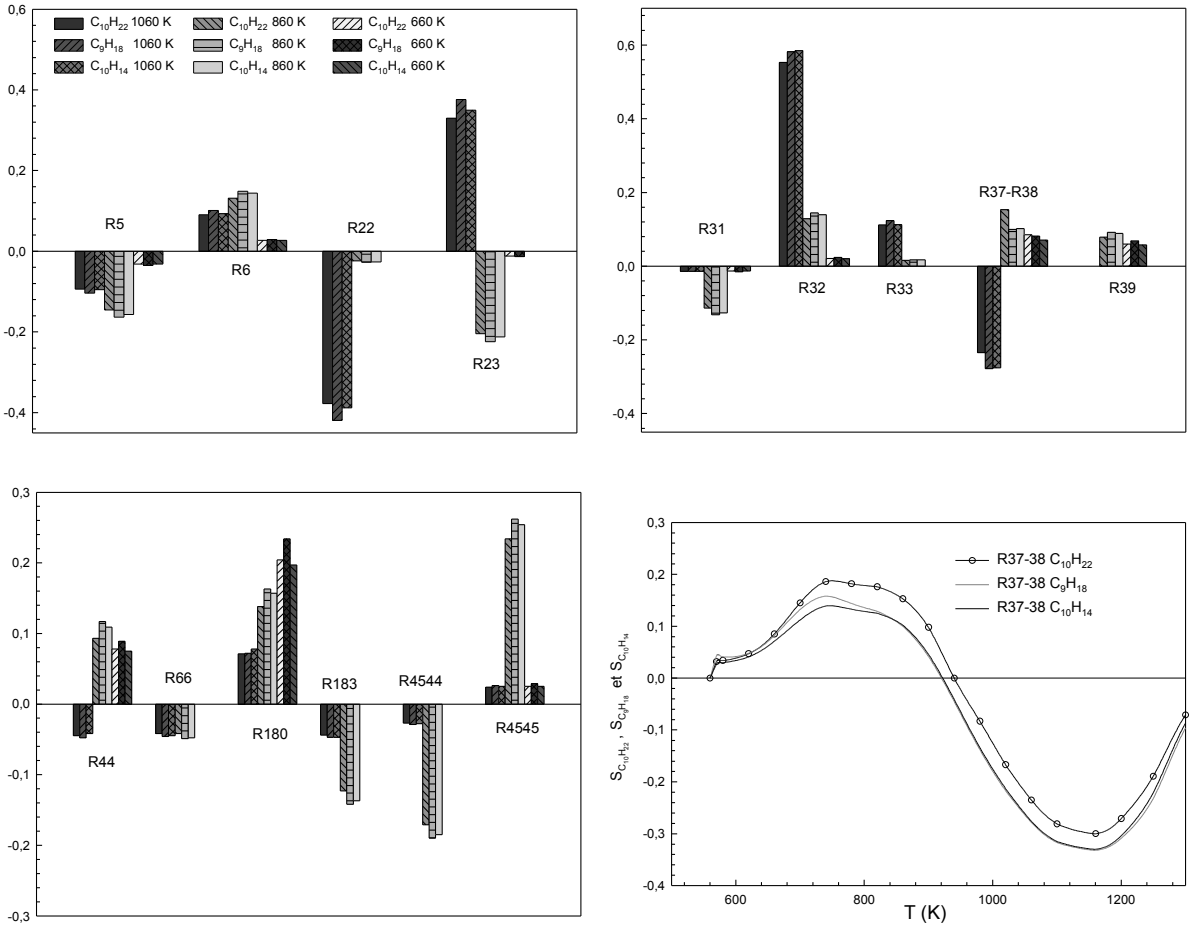


Figure V.65: Analyse de sensibilité pour le n-décane et le n-butylbenzène lors de l'oxydation du mélange binaire n-décane/n- butylbenzène en réacteur auto-agité à 10 atm et φ=0,25

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

CONCLUSION

Afin de simuler les résultats expérimentaux présentés dans le chapitre IV, nous avons développé un mécanisme cinétique d'oxydation du n-décane, du n-propylcyclohexane et du n-butylbenzène à basse et haute température.

La base réactionnelle C_0-C_4 de ce mécanisme est issu des travaux de Le Cong [4] et Yahyaoui [15], avec néanmoins quelques modifications. Nous avons ensuite ajouté à cette base un sous-mécanisme d'oxydation du n-décane. Ce sous-mécanisme provient initialement d'un modèle généré par Exgas [22], mais que nous avons modifié (distinction des isomères, nouvelles voies de dégradation, réévaluation des paramètres cinétiques). Les réactions relatives à l'oxydation de haute température du propylcyclohexane proviennent des travaux de Mati [25] et ont ensuite été complétées par celles relatives à l'oxydation de basse température de cet hydrocarbure en s'inspirant de récents mécanismes cinétiques d'oxydation du cyclohexane [35, 36] et du méthylcyclohexane [37]. Enfin le sous-mécanisme d'oxydation du butylbenzène a pour origine le mécanisme de Ribaucour *et al* [46] pour la partie basse température auquel ont été ajoutées les réactions de haute température (en s'inspirant des travaux de Brezinsky *et al* [58]) et le mécanisme de dégradation des hydrocarbures aromatiques disponible dans le modèle de Mati [25].

Ce mécanisme a ensuite été confronté à nos résultats expérimentaux (composés purs et mélanges), et a fourni des résultats en très bon accord avec l'expérience, même si le sous-mécanisme d'oxydation de basse température du propylcyclohexane nécessite des améliorations. D'autres résultats disponibles dans la littérature (délais d'auto-inflammation en tube à choc, profils d'espèces en réacteur à écoulement) ont également été modélisés avec succès.

Des analyses de voies réactionnelles ont mis en évidence les voies majoritaires de dégradation de ces 3 hydrocarbures en fonction de la température, et ont révélé qu'ils présentaient tous trois un comportement typique de celui des alcanes avec une addition de l'oxygène sur les radicaux alkyles aux plus faibles températures, progressivement remplacées par des réactions d'oxydation et de rupture de liaisons C−C et C−H avec l'augmentation de température. De plus ces analyses ont également montré que les interactions principales entre les 3 mécanismes primaires se limitaient à celles impliquant les petits radicaux (C_0-C_4).

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Par la suite des analyses de sensibilité ont permis d'identifier les réactions influençant le plus l'oxydation de ces 3 hydrocarbures. A basse température, celle-ci est très sensible aux réactions des mécanismes primaires (réactions de métathèse avec le radical OH), mais dès 750 K les réactions de la base C_0-C_2 deviennent les plus influentes (notamment celles impliquant le radical HO_2). Lors de l'oxydation des mélanges, on a également pu remarquer que cette influence était identique pour chacun des 3 hydrocarbures.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

[1] A. A. Konnov

Detailed reaction mechanism for small hydrocarbons combustion. Release 0.5 http://homepages.vub.ac.be/~akonnov/, 2000

[2] K. J. Hughes, T. Turányi, A. R. Clague and M. J. Pilling

Development and testing a comprehensive chemical mechanism for the oxidation of methane, International Journal of Chemical Kinetics, 2001, vol. 33, pp. 513-538 http://www.chem.leeds.ac.uk/Combustion/Combustion.html

[3] G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. T. Bowman, R. K. Hanson, S. Song, W. C. Gardiner Jr., V. V. Lissianski and Z. Qin

http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/

[4] T. Le Cong

Étude expérimentale et modélisation de la cinétique de combustion de combustibles gazeux: méthane, gaz naturel et mélanges contenant de l'hydrogène, du monoxyde de carbone et de l'eau, Thèse, Université d'Orléans, 2007

[5] D. L. Baulch, C. J. Cobos, R. A. Cox, C. Esser, P. Franck, Th. Just, J. A. Kerr, M; J. Pilling, J. Troe, W. Tsang, R. W. Walker and J. Warnatz

Evaluated kinetic data for combustion modelling, Journal of Physical and Chemical Reference Data, 1992, vol. 21, pp. 411-734

[6] W. Tsang and R. F. Hampson

Chemical kinetic data base for combustion chemistry. Part I. Methane and related compounds, Journal of Physical and Chemical Reference Data, 1986, vol. 15, pp. 1087-1279

[7] D. L. Baulch, C. J. Cobos, R. A. Cox, P. Franck, G. Hayman, Th. Just, J. A. Kerr, T. Murrells, M; J. Pilling, J. Troe, R. W. Walker and J. Warnatz

Summary table of evaluated kinetic data for combustion modeling: supplement I, Combustion and Flame, 1994, vol. 98, pp. 59-79

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[8] M;T. Raventós-Duran, M; McGillen, C. J. Percival, P. D. Hamer and D. E. Shallcross

Kinetics of the CH_3O_2+HO_2 reaction: a temperature and pressure dependance using chemical ionization mass spectrometry, International Journal of Chemical Kinetics, 2007, vol 39, pp. 571-579

[9] J. A. Miller and S. J. Klippenstein

The reaction between ethyl and molecular oxygen II: further analysis, International Journal of Chemical Kinetics, 2001, vol 33, pp. 654-668

[10] J. D. DeSain, S. J. Klippenstein, J. A. Miller and C. A. Taatjes

Measurements, theory, and modeling of OH formation in ethyl+O_2 and propyl+O_2 reactions, Journal of Physical Chemistry A, 2003, vol. 107, pp. 4415-4427

[11] K. Mahmud and A. Fontijn

A high-temperature photochemistry kinetics study of the reaction of O(P-3) atoms with acetylene from 290 K to 1510 K, Journal of Physical Chemistry, 1987, vol. 91, pp. 1918-1921

[12] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz and C. K. Westbrook

A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation, Combustion and Flame, 2002, vol. 129, pp. 253-280

[13] A. Nicolle

Étude expérimentale et modélisation des aspects cinétiques de la combustion sans flamme, Thèse, Université d'Orléans, 2005

[14] J. W. Bozzelli and A. M. Dean

Hydrocarbon radical reactions with O_2: comparison of allyl, formyl, and vinyl to ethyl, Journal of Physical Chemistry, 1993, vol. 97, pp. 4427-4441

[15] M. Yahyaoui

Étude cinétique de la formation de polluants à partir de mélanges représentatifs des essences, Thèse, Université d'Orléans, 2005

[16] A. M. Dean and P. R. Westmoreland

Bimolecular QRRK analysis of methyl radical reactions, International Journal of Chemical Kinetics, 1987, vol 19, pp. 207-228

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[17] J. A. Miller and S. Klippenstein

The recombination of propargyl radicals and other reactions on a C_6H_6 potential, Journal of Physical Chemistry A, 2003, vol. 107, pp. 7783-7799

[18] J. P. Senosiain and J. A. Miller

The reaction of n- and i-C_4H_5 radicals with acetylene, Journal of Physical Chemistry A, 2007, vol. 111, pp. 3740-3747

[19] P. Dagaut and G. Dayma

Hydrogen-enriched natural gas blend oxidation under high-pressure conditions: experimental and detailed chemical kinetic modeling, International Journal of Hydrogen Energy, 2006, vol. 31, pp. 505-515

[20] A. Burcat, K. Scheller and A. Lifshitz

*Shock-tube investigation of comparative ignition delay times for C_1-C_5 alkane*s, Combustion and Flame, 1971, vol. 16, pp. 29-33

[21] E. L. Petersen, J. M. Hall, S. D. Smith, A. R. Amadio and M. W. Crofton

Ignition of lean methane-based fuel blends at gas turbine pressures, Proceedings of GT2005, ASME Turbo Expo 2005: Power for Land, Sea and Air, June 6-9, 2005, Reno-Tahoe, Nevada, USA, paper GT2005-68517

[22] V. Warth, N. Stef, P.A. Glaude, F. Battin-Leclerc, G. Scacchi, G. M. Côme

Computer-aided derivation of gas-phase oxidation mechanisms: application to the modeling of the oxidation of n-butane, Combustion and Flame, 1998, vol. 114, pp. 81-102

[23] C. Muller, V. Michel, G. Scacchi and G. M. Côme

THERGAS: a computer program for the evaluation of thermochemical data of molecules and free radicals in the gas phase, Journal de Chimie Physique et Physico-Chimie Biologique, 1995, vol. 92, pp. 1154-1178

[24] V. Bloch-Michel

Logiciel d'estimation de paramètres cinétiques de processus élémentaires en phase gazeuse, Thèse, Institut National Polytechnique de Lorraine, Nancy, 1995

[25] K. Mati

Cinétique de combustion du gazole. Étude des aspects chimiques, Thèse, Université d'Orléans, 2005

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[26] J. C. Brocard, F. Baronnet and H. E. O'Neal

Chemical Kinetics of the oxidation of MTBE, Combustion and Flame, 1983, vol. 52, pp. 25-35

[27] G. Bikas and N. Peters

Kinetic modeling of n-decane combustion and autoignition, Combustion and Flame, 2001, vol. 126, pp. 1456-1475

[28] S. P. Zeppieri, S. D. Klotz and F. L. Dryer

Modelling concepts for larger carbon number alkanes: a partially reduced skeletal mechanism for n-decane oxidation and pyrolysis, Proceedings of the Combustion Institute, 2000, vol. 28, pp.781-789

[29] P. Dagaut, M. Reuillon and M. Cathonnet

High pressure oxidation of liquid fuels from low to high temperature. 3.n-decane, Combustion Science and Technology, 1994, vol. 103, pp.349-359

[30] D. Voisin

Cinétique chimique d'oxydation d'hydrocarbures et obtention d'un modèle pour la combustion du kérosène, Thèse, Université d'Orléans

[31] E. Olchanski and A. Burcat

Decane oxidation in a shock tube, International Journal of Chemical Kinetics, 2006, vol. 38, pp.703-713

[32] D. F. Davidson, J. T. Herbon, D. C. Horning and R. K. Hanson

OH concentration time histories in n-alkane oxidation, International Journal of Chemical Kinetics, 2001, vol. 33, pp.775-783

[33] A. Ristori

Modélisation de la combustion du gazole. Étude des aspects chimiques, Thèse, Université d'Orléans, 2000

[34] A. Ristori, P. Dagaut, A. El Bakali and M. Cathonnet

The oxidation of n-propylcyclohexane: experimental results and kinetic modelling, Combustion Science and Technology, 2001, vol. 165, pp. 197-228

[35] E. J. Silke, W. J. Pitz, C. K. Westbrook and M. Ribaucour

Detailed chemical kinetic modeling of cyclohexane oxidation, Journal of Physical Chemistry A, 2007, vol. 111, pp. 3761-3775

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[36] C. Cavalotti, R. Rota, T. Faravelli and E. Ranzi

An initio evaluation of primary cyclo-hexane oxidation reaction rates, Proceedings of the Combustion Institute, 2007, vol. 31, pp. 201-209

[37] W. J. Pitz, C. V. Naik, T. Nì Mhaoldúin, C. K. Westbrook, H. J. Curran, J. P. Orme and J. M. Simmie

Modeling and experimental investigation of methylcyclohexane ignition in a rapid compression machine, Proceedings of the Combustion Institute, 2007, vol. 31, pp. 267-275

[38] E. R. Ritter and J. W. Bozzelli

*THERM: thermodynamic property estimation for gas phase radicals and molecul*e, International Journal of Chemical Kinetics, 1991, vol. 23, pp. 767-778

[39] J. P. Orme, H. J. Curran and J. M. Simmie

An experimental and modelling study of methyl cyclohexane pyrolysis and oxidation, Journal of Physical Chemistry A, 2006, vol. 110, pp. 114-131

[40] A. M. Dean

Predictions of pressure and temperature effects upon radical addition and recomnination reactions, Journal of Physical chemistry, 1985, vol. 89, pp. 4600-4608

[41] S. M. Handford-Styring and R. W. Walker

Arrhenius parameters for the reaction of HO_2+cyclohexane between 673 and 773 K, and for H atom transfer in cyclohexylperoxy radicals, Physical Chemistry and Chemical Physics, 2001, vol. 3, pp. 2043-2052

[42] R. W. Walker and C. Morley

In Comprehensive Chemical Kinetics, vol. 35, 1997, Edited by R. G. Compton and G. Hancock, Elsevier, New-York

[43] D. M. Matheu, W. H. Green, Jr., J. M. Grenda

Capturing pressure-dependence in automated mechanism generation: reactions through cycloalkyl intermediates, International Journal of Chemical Kinetics, 2003, vol. 35, pp.95-119

[44] D. Voisin, A. Marchal, M. Reuillon, J.-C. Boettner and M. Cathonnet

Experimental and kinetic modelling study of cyclohexane oxidation in a JSR at high pressure, Combustion Science and Technology, 1998, vol. 138, pp. 137-158

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[45] D. J. M. Ray, R. Ruiz Diaz and D. J. Waddington

Gas-phase oxidation of butene-2: the role of acetaldehyde in the reaction, Proceedings of the Combustion Institute, 1973, vol. 14, pp. 259-266

[46] M. Ribaucour, A. Roubaud, R. Minetti and L. R. Sochet

The low-temperature autoignition of alkylaromatics: experimental study and modeling of the oxidation of n-butylbenzene, Proceedings of the Combustion Institute, 2000, vol. 28, pp. 1701-1707

[47] H. Hipler, C. Reihs and J. Troe

Shock tube UV study of the oxidation of benzyl radicals, Proceedings of the Combustion Institute, 1991, vol. 23, pp. 37-43

[48] C. Ellis, M.S. Scott and R. W. Walker

Addition of toluene and ethylbenzene to mixtures of H_2 and O_2 at773 K: Part 2: Formation of products and determination of kinetic data for H+additive and for other elementary reactions involved, Combustion and Flame, 2003, vol. 132, pp. 291-304

[49] R. Sivaramakrishnan, R.S. Tranter, K. Brezinsky

High-pressure, high-temperature oxidation of toluene, Combustion and Flame, 2004, vol. 139, pp. 340-350

[50] M. Scott and R. W. Walker

Addition of toluene and ethylbenzene to mixtures of H_2 and O_2 at773 K: Part I: Kinetic measurements for H and HO_2 reactions with the additives and a data base for H abstraction by HO_2 from alkanes, aromatics and related compounds, Combustion and Flame, 2002, vol. 129, pp. 365-377

[51] D. L. Baulch, C. T. Bowman, C. J. Cobos, R. A. Cox, Th. Just, J. A. Kerr, M. J. Pilling, D. Stocker, J. Troe, W. Tsang, R. W. Walker and J. Warnatz

Evaluated kinetic date for combustion modeling: supplement II, Journal of physical and Chemical Reference Data, 2005, vol. 34, pp. 757-

[52] J. L. Emdee, K. Brezinsky and I. Glassman

A kinetic model for the oxidation of toluene near 1200 K, Journal of Physical Chemistry, 1992, vol. 96, pp. 2151-2161

[53] P. Franck, J. Herzler, Th. Just and C. Wahl

High temperature reactions of phenyl oxidation, Proceedings of the Combustion Institute, 1994, vol. 25, pp. 833-840

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

[54] T. Seta, M. Nakajima and A. Miyoshi

High temperature reactions of OH radicals with benzene and toluene, Journal of Physical Chemistry A, 2006, vol. 110, pp. 5081-5090

[55] H. Hippler, C. Reihs and J. Troe

Elementary steps in the pyrolysis of toluene and benzyl radicals, Zeitschrift für Physikalische Chemie, Neue Folge, 1990, vol. 167, pp. 1-16

[56] D. Robaugh and W. Tsang

Mechanism and rate of hydrogen atom attack on toluene at high temperature, Journal of Physical Chemistry, 1986, vol. 90, pp. 4159-4163

[57] J. Lee and J. W. Bozzelli

Thermochemical and kinetic analysis of the allyl radical with O_2 reaction system, Proceedings of the Combustion Institute, 2005, vol. 30, pp. 1015-1022

[58] K. Brezinsky, G. T. Linteris, T. A. Litzinger and I. Glassman

High temperature oxidation of n-alkyl benzenes, Proceedings of the Combustion Institute, 1986, vol. 21, pp. 833-840

[59] H. Freund and W. N. Olmstead

Detailed chemical kinetic modeling of butylbenzene pyrolysis, International Journal of Chemical Kinetics, 1989, vol. 21, pp. 561-574

[60] T. A. Litzinger, K. Brezinsky and I. Glassman

Gas-phase oxidation of isopropylbenzene at high temperature, Journal of Physical Chemistry, 1986, vol. 90, pp. 508-513

[61] A. Marchal

Étude de la contribution des familleschimiques constitutives des gazoles à la formation de polluants non réglementés, Thèse, Universite d'Orléans, 1997

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

© 2009 Tous droits réservés.

http://doc.univ-lille1.fr

CONCLUSION

L'objectif de ce travail de thèse était d'étudier l'oxydation de basse et haute température de 3 hydrocarbures (utilisables pour constituer un gazole modèle), purs et en mélange. Il s'agissait également de construire par la suite un modèle cinétique détaillé d'oxydation pour ces 3 composés et leurs mélanges.

La première étape de ce travail a donc été l'étude de l'oxydation des 3 hydrocarbures de référence choisis, le n-décane, le n-propylcyclohexane et le n-butylbenzène, et de leurs mélanges. Les études ont été réalisées au moyen d'un réacteur auto-agité par jets gazeux à pression et temps de passage constants. Ces expériences sont rappelées dans le tableau ci-dessous.

Hydrocarbure	Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{HC} initiale *	richesse	Température (K)
décane	10	1	1.10^{-3}	0,25-0,50	550-1160
n-propylcyclohexane	10	1	1.10^{-3}	0,25	550-1000
n-butylbenzène	10	1	1.10^{-3}	0,25-1,50	550-1150
n-décane/n-propyl-cyclohexane 60/40 (mole/mole)	10	1	1.10^{-3}	0,25-1,50	550-1150
n-décane/n-butyl-benzène 60/40 (mole/mole)	10	1	1.10^{-3}	0,25-1,50	550-1110
n-décane/n-propyl-cyclohexane/n-butyl-benzène 40/30/30 (mole/mole/mole)	10	1	1.10^{-3}	0,25-1,50	550-1150

*: fraction molaire du carburant

L'analyse des échantillons par chromatographie (CPG-TCD-FIS-MS) a permis d'identifier et d'obtenir les profils de concentration en fonction de la température pour les réactifs, les produits et

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

les principaux intermédiaires stables. Dans toutes les expériences, les principales espèces détectées furent CO, C_2H_4, C_3H_6 et CH_4.

A basse température, le n-décane forme de nombreux composés carbonylés (aldéhydes) et des éthers cycliques. Ces éthers cycliques sont essentiellement des tétrahydrofuranes substitués en position 2 et 5. Ces espèces proviennent des voies de consommation de basse température (addition avec l'oxygène, isomérisation) des radicaux décyles. Au-delà de 700 K, les 1-alcènes, de l'éthylène au 1-nonène, sont formés en grande quantité. La concentration détectée est inversement proportionnelle à la taille de la chaîne carbonée. Ces composés insaturés sont formés, pour les plus lourds, par décomposition unimoléculaire des radicaux décyles.

Ce travail a constitué la première étude expérimentale de l'oxydation de basse température du n-propylcyclohexane en réacteur. Quelques oléfines conjuguées (propylcyclohexènes, propylidènecyclohexane) ont été détectées, ainsi que quelques composés cycliques insaturés (cyclohexène, méthylènecyclohexane, benzène). Les composés cycliques ne représentent cependant qu'une faible proportions des espèces détectées: l'ouverture du cycle est une voie de dégradation prépondérante dans tout le domaine de température.

L'oxydation du n-décane et du n-propylcyclohexane présentent toutes deux le même comportement. Ce comportement est caractéristique de l'oxydation des hydrocarbures à chaîne longue. Une flamme froide, localisée entre 550 et 750 K, se développe et se termine par une zone de coefficient négatif de température (630-700 K). Au-delà de 750 K, la réactivité du mélange augmente de nouveau et se caractérise par une production importante de CO, CO_2 et C_2H_4.

L'oxydation du n-butylbenzène s'est principalement caractérisée par la formation de nombreuses espèces aromatiques dont le styrène et le benzaldéhyde sont les principaux représentants. Ces 2 composés ont été détectés aussi bien à haute qu'à basse température. L'oxydation de cet hydrocarbure se singularise également par la faible amplitude de sa flamme froide, qui est même absente pour des richesses élevées.

L'étude de l'oxydation des différents mélanges n'a pas révélé la présence en quantité notable de nouvelles espèces intermédiaires, autre que celles produites par les composés purs. Ceci nous indique que les interactions, via des réactions croisées, entre les mécanismes d'oxydation des 3 hydrocarbures ont une faible importance. Cependant, le calcul des vitesses d'oxydation globales a néanmoins permis de mettre en évidence l'existence d'interactions. En effet, si les vitesses de consommation du n-décane et du n-propylcyclohexane sont peu influencées par la présence d'un

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

autre hydrocarbure, ce n'est pas le cas du n-butylbenzène. L'oxydation de cet hydrocarbure aromatique est fortement accélérée à basse température en présence de décane. Cet effet se traduit par l'apparition d'une flamme froide très intense, même en milieu riche. Ces interactions, qui peuvent ainsi avoir une très forte influence, se font essentiellement via des espèces de faible taille (C_0-C_4).

La deuxième étape de ce travail a été le développement d'un mécanisme cinétique d'oxydation pour ces 3 composés. La base réactionnelle C_0-C_4 de ce mécanisme vient des travaux de Le Cong [1] pour le sous-mécanisme C_0-C_2 et de ceux de Yahyaoui [2] pour celui des composés en C_3-C_4. Les paramètres cinétiques de certaines de ces réactions ont toutefois été réévalués. Nous avons par la suite greffé à cette base les différents sous-mécanismes d'oxydation des 3 hydrocarbures étudiés.

Le sous-mécanisme du n-décane trouve ses origines en grande partie dans un mécanisme cinétique généré par le logiciel Exgas. Ce mécanisme a été grandement modifié, aussi bien au niveau des voies réactionnelles envisagées que dans l'estimation des paramètres cinétiques:

- distinction des différents isomères des composés (éthers cycliques, cétohydroperoxydes) à 10 atomes de carbone
- modification des voies de dégradation de ces mêmes composés en C_{10} et des espèces résultantes
- ré-évaluation des constantes de vitesse des réactions d'isomérisation, de décomposition des cétohydroperoxydes,...

Le sous-mécanisme d'oxydation du n-propylcyclohexane à haute température provient du mécanisme proposé par Mati [3]. Il a ensuite été complété par les réactions associées au mécanisme de basse température. Les réactions ainsi proposées suivent le schéma traditionnel de dégradation de basse température des alcanes, auquel a été ajouté certaines réactions alternatives suggérées par Silke *et al* [4] (isomérisation des radicaux peroxyhydroperoxycyclohexyles par arrachement d'un atome d'hydrogène sur un atome de carbone ne portant pas de groupement HO_2). Ces travaux ont également permis d'estimer, à partir des corrélations utilisées pour le n-décane, les paramètres cinétiques des réactions d'isomérisation en tenant compte de la présence d'un cycle initial à 6 atomes de carbone. L'écriture de ce mécanisme représente la 1ère tentative de modélisation de l'oxydation de basse température du n-propylcyclohexane.

L'élaboration du sous-mécanisme d'oxydation du n-butylbenzène a d'abord consisté en l'incorporation du sous-mécanisme d'oxydation du n-propylbenzène proposé par Mati [3], qui a été

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

légèrement modifié. A cette base ont été ajoutées les réactions proposées par Ribaucour *et al* [5] pour l'oxydation de basse température du n-butylbenzène. Les voies de décomposition de haute température ont ensuite été insérées en s'inspirant, pour les chemins réactionnels, du schéma de dégradation proposé par Brezinsky *et al* [6]. Les paramètres cinétiques de ces nouvelles réactions ont ensuite été estimés à partir des réactions équivalentes proposées pour le n-propylbenzène.

Enfin, l'écriture du mécanisme s'est achevée par l'ajout de réactions d'interaction entre les 3 sous-mécanismes. Ces réactions font intervenir les radicaux alkyles, alkoxy et peroxyalkyles à travers des réactions de métathèse ($RH + R' = R'H + R$, $RH + RO_2 = R + R'O_2H$), de dismutation ($RO_2 + R'O_2 = RO + R'O + O_2$) et de rétrodismutation ($R + R'O_2 = RO + R'O$). Les constantes de vitesse associées à ces réactions ont été estimées par analogie avec des réactions équivalentes.

Le mécanisme cinétique obtenu par assemblage de ces différents sous-mécanismes est constitué de 2255 espèces et 8626 réactions (majoritairement réversibles). Il a été testé par simulation de nos expériences menées en réacteur auto-agité. L'accord observé entre les prévisions du modèle et les résultats expérimentaux s'avère globalement satisfaisant. Les désaccords les plus importants sont observés dans le cas du n-propylcyclohexane dont l'oxydation de basse température est mal simulée (surestimation de C_2H_4, C_5H_{10}, amplitude du coefficient négatif de température trop faible). Ce modèle a également été confronté avec succès à des résultats disponibles dans la littérature (délais d'auto-inflammation en tube à choc, profils d'espèces en réacteur à écoulement).

Les voies préférentielles de dégradation des 3 hydrocarbures ont été mises en évidence grâce à des analyses cinétiques. Ces analyses mettent en jeu le calcul des vitesses de formation et de consommation des espèces considérées dans le mécanisme. Les 3 hydrocarbures réagissent, quelle que soit la température, majoritairement par des réactions de métathèse avec le radical OH. Les radicaux alkyles réagissent ensuite par addition avec l'oxygène suivie d'une isomérisation-addition avec l'oxygène-décomposition par rupture de liaisons O−O et C−O à basse température. Aux températures intermédiaires (700-900 K), les radicaux alkyles réagissent avec l'oxygène selon soit une réaction d'oxydation (formation d'oléfines conjuguées) soit par un schéma d'addition-isomérisation-décomposition. Aux plus hautes températures (T>1000 K), les radicaux alkyles réagissent préférentiellement via des réactions de β-scission C−C pour former des alcènes, ou dans le cas du propylcyclohexane selon des réactions d'oxydation et de rupture de liaisons C−H.

Les analyses de sensibilité ont permis de mettre en évidence les réactions les plus influentes sur la vitesse d'oxydation des 3 hydrocarbures. Aux plus basses températures, les réactions de métathèse des réactifs avec le radical OH sont les réactions les plus sensibles. Dès 750 K, ce sont

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

les réactions de la base C_0-C_2, et plus particulièrement les réactions R22 ($H+O_2 \leftrightarrows OH+O$), R23 ($H+O_2+M \leftrightarrows HO_2+M$), R32 ($HO_2+OH \leftrightarrows H_2O+O_2$) et R37-38 ($HO_2+HO_2 \leftrightarrows H_2O_2+O_2$). La réaction R22 favorise la consommation des réactifs car elle produit des centres actifs (réaction de ramification) tandis que la réaction R32 les consomme pour former des espèces stables. Cette réaction ralentit donc la consommation des réactifs initiaux. La réaction R23 a un effet positif sur la réactivité en dessous de 1000 K et entre en concurrence avec la réaction R22 au-delà de cette température. Quant à la réaction R37-38, son influence est fortement liée aux voies de dégradation du peroxyde d'hydrogène: lorsque H_2O_2 se décompose (par métathèse) en radical HO_2, cette réaction présente un coefficient de sensibilité positif alors que ce coefficient devient négatif lorsque H_2O_2 se décompose en 2 radicaux OH.

D'un point de vue expérimental, il serait souhaitable de compléter l'étude de l'oxydation de basse température du n-propylcyclohexane, d'identifier et de quantifier les éventuels éthers polycycliques formés. Ce dernier point pourrait également être envisagé dans le cas du n-butylbenzène.

Le mécanisme développé dans cette étude fournit des résultats satisfaisants, mais nécessite tout de même des améliorations. En particulier, le sous-mécanisme du n-propylcyclohexane doit être modifié. Les voies de décomposition des radicaux dihydroperoxyliques doivent être revisitées, et les méthodes d'estimation des constantes de vitesse des réactions d'isomérisation devront être affinées. Il sera alors peut-être nécessaire d'envisager de calculer certaines de ces constantes de vitesse à l'aide de méthodes de chimie quantique. Ces méthodes permettraient en effet de tenir compte des contraintes stériques et des tensions de cycle de manière bien plus précise.

Suite à cela, la validité du mécanisme devrait être étendue à un plus large domaine de température et de pression, en le confrontant à des résultats obtenus en tube à choc, machine à compression rapide et flamme (structure et vitesses de flamme).

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

[1] T. Le Cong

Étude expérimentale et modélisation de la cinétique de combustion de combustibles gazeux: méthane, gaz naturel et mélanges contenant de l'hydrogène, du monoxyde de carbone et de l'eau, Thèse, Université d'Orléans, 2007

[2] M. Yahyaoui

Étude cinétique de la formation de polluants à partir de mélanges représentatifs des essences, Thèse, Université d'Orléans, 2005

[3] K. Mati

Cinétique de combustion du gazole. Étude des aspects chimiques, Thèse, Université d'Orléans, 2005

[4] E. J. Silke, W. J. Pitz, C. K. Westbrook and M. Ribaucour

Detailed chemical kinetic modeling of cyclohexane oxidation, Journal of Physical Chemistry A, 2007, vol. 111, pp. 3761-3775

[5] M. Ribaucour, A. Roubaud, R. Minetti and L. R. Sochet

The low-temperature autoignition of alkylaromatics: experimental study and modeling of the oxidation of n-butylbenzene, Proceedings of the Combustion Institute, 2000, vol. 28, pp. 1701-1707

[6] K. Brezinsky, G. T. Linteris, T. A. Litzinger and I. Glassman

High temperature oxidation of n-alkyl benzenes, Proceedings of the Combustion Institute, 1986, vol. 21, pp. 833-840

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

ANNEXE 1: CHROMATOGRAPHIE EN PHASE GAZEUSE – CARACTÉRISTIQUES DU MATÉRIEL UTILISÉ

Chroma-tographe	Colonnes	Gaz vecteur	Programmation de température	Détecteur	Composés détectés
Varian 3300	CP-CarboPLOT P7 L = 25 m D_{int} = 0,53 mm D_f = 50 µm	N_2 15 mL.mn^{-1}	T=50°C t = 5 mn isotherme	TCD	H_2
Varian CP 3800	CP-Poraplot U L = 27,5 m D_{int} = 0,53 mm D_f = 20 µm CP-Molseive 5Å L = 25 m D_{int} = 0,53 mm D_f = 50 µm	He 32,3 mL.mn^{-1}	T_i=50°C t_i=3 mn v=18°C/mn T_f=150°C t_f=24,44 mn	TCD	O_2
				FID + méthaniseur	CO, CO_2, CH_2O
Varian 3400	CP-Al_2O_3/KCl L = 50 m D_{int} = 0,32 mm D_f = 5 µm	He 1,5 mL.mn^{-1}	T_i=70°C t_i=0 mn v=10°C/mn T_f=200°C t_f=20 mn	FID	HC<C7
Varian CP 3800	DB 624 L = 30 m D_{int} = 0,32 mm D_f = 1,80 µm	He 0,7 mL.mn^{-1}	T_i=40°C t_i=10 mn v_1=7°C/mn T_1=140°C t_1=12 mn v_2=2°C/mn T_2=200°C t_i=6 mn v_3=20°C/mn T_f=250°C t_f=5 mn	FID + 1200MS	HC Oxygénés
Varian 3800	DB-5MS L = 50 m D_{int} = 0,25 mm D_f = 1 µm	He 1 mL.mn^{-1}	T_i=50°C t_i=5 mn v=10°C/mn T_f=150°C t_f=10 mn	FID + Saturn 2000 (MS)	Analyse en ligne HC + Oxygénés

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

ANNEXE 2: OUTILS DE CALCULS

Le logiciel CHEMKIN II [1], développé aux Sandia National Laboratories de Livermore a été utilisé dans toutes nos travaux de modélisation. Ce programme permet d'interpréter le mécanisme réactionnel élaboré. Ce mécanisme se présente sous la forme de 2 fichiers, l'un contenant l'ensemble des réactions et leurs paramètres cinétiques, l'autre les données thermodynamiques de toutes les espèces déclarées dans le mécanisme. A partir de ces 2 fichiers, le logiciel lit les données thermodynamiques de chaque espèce, les réactions et leurs paramètres cinétiques, vérifie la balance atomique de ces réactions, calcule les constantes de vitesse inverses (à partir de la constante d'équilibre) et génère finalement un fichier de liaison binaire. Ce fichier est ensuite utilisé par les différents codes de calculs (PSR, SENKIN, PREMIX,...).

Ces codes de calculs permettent de résoudre les équations de conservation de matière et d'énergies propres à différents dispositifs expérimentaux. Les résultats de modélisation de ces codes sont répertoriées dans des fichiers de sortie (binaire et texte). Ces fichiers contiennent toutes les informations relatives aux espèces mises en jeu et demandées par l'utilisateur (concentrations, vitesses de consommation et de formation, analyse de sensibilité, ...)

6. Mécanisme réactionnel (fichier chem.inp)

Ce fichier se divise en partie et contiennent toutes des informations essentielles à la lecture du mécanisme par CHEMKIN. La première partie permet de déclarer les différents éléments chimiques qui interviennent dans le mécanisme. Dans la deuxième section sont déclarées les espèces qui vont intervenir dans le mécanisme. Enfin, la dernière partie regroupe la totalité des réactions du mécanisme.

Ces réactions peuvent être prises en compte de manière réversible(symbole = ou <=> entre les réactifs et produits) ou de manière irréversible (=>). A la suite de la description de la réaction sont indiqués les paramètres cinétiques sous la forme de 3 coefficients (A, n, E), chacun correspondant à un paramètre de l'équation d'Arrhénius modifiée:

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

$$k = A \times T^n \times \exp(-\frac{E}{RT})$$

Parmi ces réactions, les réactions unimoléculaires (décomposition) et trimoléculaires (recombinaison) dépendent de la pression et sont les plus complexes à gérer. Elles font intervenir dans leur symbolisme un partenaire de collision noté M, qui représente n'importe quelle espèce du mécanisme. Un coefficient d'efficacité est attribué à chaque partenaire de collision et sa valeur est indiquée à la suite des paramètres cinétiques. Dans les symbolisme utilisé, M peut être noté de 2 manières différentes selon que la réaction se trouve en limite basse pression ou dans le domaine de "fall-off".

Lorsque la réaction est en limité basse pression, le 3ème corps M n'est pas noté entre parenthèses. Seule la constante de vitesse basse pression est alors indiquée:

H + O2 +M = HO2 + M 8,000E+17 -0,80 0,0

Dans le cas où le 3ème corps est noté entre parenthèse, la réaction est dans la zone de "fall-off". Les constantes de vitesse haute et basse pression (k_∞ et k_0 respectivement) sont alors précisées, et l'effet de la pression peut alors être par 2 formalismes différents: celui de Lindemann et celui de Troe.

- **<u>Le formalisme de Lindemann</u>**

A + B (+M) = AB (+M)	A_∞	n_∞	E_∞
	LOW / A_0	n_0	E_0/

- <u>Cas des réactions unimoléculaires</u>

Les principales réactions unimoléculaires sont les réactions de décomposition et d'isomérisation. La théorie de Lindemann décompose cette réaction en 2 étapes faisant intervenir un composé activé noté A^*, formé par collision entre le réactif et le troisième corps, qui forme ensuite les produits de réaction. Ce schéma réactif s'écrit de la manière suivante:

$$A + M \xrightarrow{k1} A^* + M$$

$$A^* + M \xrightarrow{k2} A + M$$

$$A^* \xrightarrow{k3} P$$

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Si l'on applique l'approximation de l'état quasi-stationnaire au composé activé A*, on obtient l'expression:

$$\frac{d[A^*]}{dt}=k_1[A][M]-k_2[A^*][M]-k_3[A^*]\approx 0$$

$$[A^*]=\frac{k_1[A][M]}{k_2[M]+k_3}$$

$$\frac{d[P]}{dt}=k_3[A^*]=\frac{k_1k_3[M]}{k_2[M]+k_3}[A]=k_{apparente}[A]$$

- ✗ A basse pression, $k_2[M]<<k_3$ $\quad k_{apparente}\approx k_3[M]=k_0[M]$
- ✗ A haute pression, $k_2[M]>>k_3$ $\quad k_{apparente}\approx\frac{k_1k_3}{k_2}=k_\infty$

■ Cas des réactions trimoléculaires

L'introduction d'un complexe activé formé par combinaison des 2 réactifs permet de décomposer la réaction selon le mécanisme suivant:

$$A+B\xrightarrow{k1}AB^*$$

$$AB^*\xrightarrow{k2}A+B$$

$$AB^*+M\xrightarrow{k3}P+M^*$$

En appliquant la même démarche que précédemment au complexe activé AB^*, nous obtenons:

$$\frac{d[AB^*]}{dt}=k_1[A][B]-k_2[AB^*][M]-k_3[AB^*][M]\approx 0$$

d'où $\quad [AB^*]=\frac{k_1[A][B]}{k_2+k_3[M]}$

$$\frac{d[P]}{dt}=k_3[AB^*][M]=\frac{k_1k_3[M]}{k_2+k_3[M]}[A][B]=k_{apparente}[A][B]$$

- ✗ A basse pression, $k_3[M]<<k_2$ $\quad k_{apparente}\approx\frac{k_1k_3[M]}{k_2}=k_0[M]$
- ✗ A haute pression, $k_3[M]>>k_2$ $\quad k_{apparente}\approx k_1=k_\infty$

Dans le domaine de fall-off, la constante de vitesse globale s'exprime alors sous la forme:

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

$$k_{apparente} = \frac{k_1 k_3 [M]}{k_2 + k_3 [M]} = \frac{k_1}{\frac{k_2}{k_3 [M]} + 1} = \frac{k_\infty}{1 + \frac{k_\infty}{k_0 [M]}}$$

avec $[M] = \sum_i f_i [M]_i$ f_i: coefficient d'efficacité de l'espèce i

- **Le formalisme de Troe**

A + B (+M) = AB (+M)	A_∞	n_∞	E_∞	
	LOW / A_0	n_0	E_0/	
	TROE / a	b	c	d/

Le formalisme de Troe permet de représenter de manière plus précise l'influence de la pression sur une constante de vitesse. Il rend compte des écarts observé entre les déterminations expérimentales et la théorie de Lindemann. Ce formalisme introduit 4 nouveaux coefficients notés a, b, c et d qui permettent de calculer un facteur correctif nommé facteur d'élargissement F, tel que $k_{Troe}=F.k_{Lindemann}$. Ce facteur d'élargissement est calculé à l'aide du paramètre de centrage F_{cent}. Les relations liant F, F_{cent} et les 4 paramètres a, b, c et d sont les suivantes:

$$\log F = \frac{\log F_{cent}}{1 + \left(\frac{\log P_r + C}{N - 0{,}14(\log P_r + C)} \right)^2}$$

$$F_{cent} = (1-a)\exp(-\frac{T}{b}) + a\exp(-\frac{T}{c}) + \exp(-\frac{d}{T})$$

$$N = 0{,}75 - 1{,}27 \log F_{cent}$$

$$C = -0{,}40 - 0{,}67 \log F_{cent}$$

$$P_r = \frac{k_0 [M]}{k_\infty}$$

7. Données thermodynamiques (fichier therm.dat)

Les données thermodynamiques des différentes espèces sont entrées sous le formalisme du « NASA Chemical Equilibrum Program » [2]. Ce format introduit 2 séries de 7 coefficients permettant de calculer les propriétés thermodynamiques dans 2 domaines de température distincts, traditionnellement entre 1000 et 5000 K (1er jeu de coefficients) et entre 300 et 1000 K (2ème jeu de coefficients).

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

Les relations liant ces coefficients aux propriétés thermodynamiques (entropie, enthalpie et chaleur spécifique) sont les suivantes:

$$\frac{C_{p,k}}{R} = a_{1,k} + a_{2,k}T + a_{3,k}T^2 + a_{4,k}T^3 + a_{5,k}T^4$$

$$\frac{H_k^0}{RT} = a_{1,k} + a_{2,k}\frac{T}{2} + a_{3,k}\frac{T^2}{3} + a_{4,k}\frac{T^3}{4} + a_{5,k}\frac{T^4}{5} + \frac{a_{6,k}}{T}$$

$$\frac{S_k^0}{R} = a_{1,k}\ln T + a_{2,k}T + a_{3,k}\frac{T^2}{2} + a_{4,k}\frac{T^3}{3} + a_{5,k}\frac{T^4}{4} + a_{7,k}$$

L'enthalpie libre peut être calculé, connaissant l'enthalpie et l'entropie de l'espèce k, selon $G^0 = H^0 + TS^0$. Il est alors possible de déterminer la constante d'équilibre des différentes réactions, et les constantes de vitesse des réactions inverses.

$$\Delta G_r^0 = G_{\text{produits}}^0 - G_{\text{réactifs}}^0 = -RT\ln(K_P)$$

$$K_C = \frac{k_{dir}}{k_{rev}} = K_P\left(\frac{P}{RT}\right)^{\sum \nu_{\text{produits}} - \sum \nu_{\text{réactifs}}}$$

ν: coefficients stœchiométriques

8. Les codes de calcul

8.1 PSR

Le code de calcul PSR, développé par Glarborg *et al* [3], est utilisé pour la modélisation des résultats obtenus en réacteur parfaitement agité. Le réacteur agité est un volume thermiquement isolé dans lequel un flux stationnaire prémélangé de réactifs est introduit. Le milieu réactionnel est fortement turbulent afin d'assurer l'homogénéité en température et composition de l'ensemble du réacteur. Dans ces conditions, le réacteur est en régime stationnaire: la vitesse de conversion des réactifs est uniquement contrôlée par la cinétique chimique.

- Équations fondamentales

Le système est caractérisé par le volume du réacteur V, le temps de séjour moyen τ, le flux massique $\dot{m}$ et la fraction massique des espèces Y_k. Le débit massique est considéré constant au travers du réacteur.

Le temps de séjour moyen (temps de passage) s'exprime en fonction du volume, du flux massique et de la densité massique comme:

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

$$\tau = \rho \frac{V}{\dot{m}} \qquad \text{avec} \quad \rho = \frac{P\overline{M}}{RT}$$

En régime stationnaire, les principes qui régissent le fonctionnement des réacteurs parfaitement agité sont la conservation de la masse et de l'énergie:

conservation de la masse: $\dot{m}(Y_{k,S} - Y_{k,E}) - \dot{\omega}_k M_k V = 0$

conservation de l'énergie: $\dot{m}\sum_{k=1}^{K}(Y_{k,S}h_{k,S} - Y_{k,E}h_{k,E}) + Q = 0$

$\dot{\omega}_k$: vitesse nette de production de l'espèce k

M_k : masse molaire de l'espèce k

Q: perte thermique du réacteur

Le système est donc décrit par un système de K+1 équations algébriques non linéaires, dont les solutions sont les fractions massiques des espèces Y_S et la température. Les données d'entrée nécessaires à la résolution de ce système sont les fractions massiques en entrée du réacteur, le débit massique, la pression. Ce système d'équations est résolu par une méthode de Newton-Raphson modifiée. Cependant dans certains cas, il est nécessaire d'intégrer numériquement le système d'équations différentielles en régime transitoire. Le système d'équation dans ces conditions est le suivant:

conservation de la masse: $\frac{dY_k}{dt} = -\frac{1}{\tau}(Y_{k,S} - Y_{k,E}) + \frac{\dot{\omega}_k M_k}{\rho}$

conservation de l'énergie: $\frac{dh}{dt} = -\frac{1}{\tau}\sum_{k=1}^{K}(Y_{k,S}h_{k,S} - Y_{k,E}h_{k,E}) - \frac{Q}{\rho V}$

- <u>Résolution du système</u>

Le système est résolu par une méthode de Newton-Raphson. Cette méthode nécessite une estimation initiale de la solution (température et composition) afin de commencer le processus itératif. Une première estimation de la composition globale finale est calculé à l'équilibre thermodynamique (à pression et température constantes) par le programme STANJAN [4]. Ce programme estime cet état d'équilibre en minimisant la fonction d'énergie libre de Gibbs.

Dans le cas où cette estimation ne permet pas de résoudre le système (pas de convergence), le système bascule sur l'intégration des équations en régime transitoire. Une nouvelle estimation de la

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

solution est alors obtenue et est utilisée pour initier une nouvelle tentative de résolution par la méthode de Newton.

- Analyses de sensibilité.

Les analyses de sensibilité permettent de déterminer quantitativement l'influence d'un paramètre sur les résultats de la modélisation. Il est ainsi possible de calculer la sensibilité des fractions massiques aux constantes de vitesse. Le coefficient de sensibilité de l'espèce k à la réaction i est alors défini comme:

$$S_{k,i} = \frac{\partial \ln Y_k}{\partial \ln k_i} = \frac{k_i}{Y_k}\left(\frac{\partial Y_k}{\partial k_i}\right)$$

Ainsi un coefficient de sensibilité $S_{k,i}$ positif signifie que la concentration de l'espèce k augmente avec la constante de vitesse k_i. Un coefficient négatif traduit une diminution de la concentration lorsque que la constante de vitesse augmente.

- Analyse de voies réactionnelles.

Cette analyse consiste à déterminer la contribution de chacune des réactions à la consommation ou la formation de l'espèce k.

Les vitesses globales de production $r_{f,k}$ et de consommation $r_{c,k}$ sur l'ensemble du mécanisme s'expriment comme:

$$r_{f,k} = \sum_{i=1}^{I} r_{f,k,i} \qquad\qquad r_{c,k} = \sum_{i=1}^{I} r_{c,k,i}$$

Les coefficients d'influence de la réaction i sur la consommation ($RC_{k,i}$) et la formation de ($RP_{f,i}$) sont donc définis par:

$$RP_{f,k} = \frac{r_{f,k,i}}{r_{f,k}} \qquad\qquad RC_{f,k} = \frac{r_{c,k,i}}{r_{c,k}}$$

8.2 SENKIN

Le code calcul SENKIN [5] permet de simuler l'évolution temporelle de la composition d'un mélange gazeux au sein d'un réacteur fermé. Il permet ainsi de simuler les résultats obtenus en tube à choc (approximation du « volume constant »), en machine à compression rapide et en réacteur à écoulement (pression constante). Dans tous les cas, le réacteur est donc considéré comme fermé et aucun flux massique ne le traverse. La masse totale $m = \sum m_k$ du mélange est donc constante.

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

- Équations fondamentales.

Chaque espèce est produite et consommée selon: $\frac{d m_k}{dt} = V \dot{\omega} M_k$

La masse totale étant constante, on peut écrire:

$$\frac{d Y_k}{dt} = v \dot{\omega} M_k \qquad v = \frac{V}{m} \quad \text{(volume spécifique)}$$

Le premier principe de la thermodynamique impose pou un composé pur dans un système adibatique fermé que du + Pdv = 0, où u est l'énergie interne du système par unité de masse et P la pression.

Pour un mélange idéal de gaz, on a: $u = \sum_{k=1}^{K} Y_k u_k$

En dérivant l'expression de l'énergie interne d'un mélange idéal, on obtient:

$$du = \sum_{k=1}^{K} Y_k du_k + \sum_{k=1}^{K} u_k dY_k$$

En supposant que les gaz soient parfaits d'un point de vue calorifique, alors $du_k = c_{v,k}.dT$,

et en définissant la capacité calorifique totale c_v, $c_v = \sum_{k=1}^{K} c_{v,k} Y_k$, l'équation de l'énergie devient:

$$c_v \frac{dT}{dt} + \sum_{k=1}^{K} u_k \frac{dY_k}{dt} + P.\frac{dv}{dt} = 0$$

En substituant $\frac{d Y_k}{dt}$ par l'expression déterminée précédemment:

$$c_v \frac{dT}{dt} + v \sum_{k=1}^{K} u_k \dot{\omega} M_k + P.\frac{dv}{dt} = 0$$

En considérant le volume comme constant: $c_v \frac{dT}{dt} + v \sum_{k=1}^{K} u_k \dot{\omega} M_k = 0$

Dans le cas où le réacteur fonctionne à pression constante (réacteur à écoulement), l'équation de l'énergie devient:

$$c_P \frac{dT}{dt} + v \sum_{k=1}^{K} h_k \dot{\omega} M_k = 0$$

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

La résolution du système nécessite donc de connaître la température, la pression et la composition initiales du mélange, ainsi que l'évolution temporelle du volume si celui-ci n'est pas constant.

- Résolution numérique.

La résolution numérique du système d'équations est réalisée par le programme DASAC (Differential Algebraic Sensitivity Analysis Code). Il permet de calculer le temps d'intégration et d'effectuer les analyses de sensibilité au 1er ordre.

- Analyses de sensibilité.

L'analyse de sensibilité permet de déterminer quantitativement l'influence l'influence des différents paramètres (constantes de vitesse, temps, ...) sur les résultats de la modélisation.

Le problème considéré est décrit par un système d'équation différentielles de la forme:

$$\frac{dZ}{dt} = F(Z, t, a)$$

où $Z = (T, Y_1, Y_2, Y_3, ..., Y_k)^t$ est le vecteur de température et de fractions massiques. A représente le facteur de fréquence de chacune des réactions.

La matrice des coefficients de sensibilité au 1er ordre est définie par:

$$\varpi_{j,i} = \frac{\partial Z_j}{\partial A_i}$$

où j représente les variables dépendantes et i les différentes réactions.

En dérivant cette expression, on obtient:

$$\frac{d\varpi_{j,i}}{dt} = \frac{\partial F}{\partial Z}\varpi_{j,i} + \frac{\partial F_j}{\partial A_i}$$

L'analyse de sensibilité nécessite donc la résolution des 2 matrices $\frac{\partial F}{\partial Z}$ et $\frac{\partial F_j}{\partial A_i}$. Le programme DASAC utilise une méthode d'approximation de ces matrices plutôt que de dériver les expressions analytiques.

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

[1] R. J. Kee, F. M. Rupley and J; A; Miller

CHEMKIN II: a Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics, SANDIA Report SAND89-8009B UC-706, 1993

[2] S. Gordon and B. J. McBride

Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks and Chapman-Jouguet detonations, NASA SP-273, 1971

[3] P. Glarborg, R. J. Kee, J. F. Grcar and J. A. Miller

PSR: a Fortran program for modeling well-stirred reactors, SANDIA Report SAND86-8209, 1993

[4] W. C. Reynolds

The element potential method for chemical equilibrium analysis: implementation in the interactive program STANJAN, Department of Mechanical Engineering, Stanford University, 1986

[5] A; E. Lutz, R. J. Kee, and J; A; Miller

SENKIN: a Fortran program for predicting homogeneous gas phase chemical kinetics with sensitivity analysis, SANDIA Report SAND87-8248B UC-401, 1992

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

ANNEXE 3: RÉSULTATS DE SIMULATIONS COMPLÉMENTAIRES

Le mécanisme élaboré durant cette thèse a été testé sur les délais d'auto-inflammation obtenus en machine à compression rapide par M. Crochet et Ribaucour *et al* (*Proceedings of the Combustion Institute*, 2000, vol. 28, pp. 1701-1707).

Pour ces simulations, nous avons considéré la machine à compression rapide comme un réacteur idéal, sans tenir compte des pertes thermiques pouvant survenir avant l'auto-inflammation.

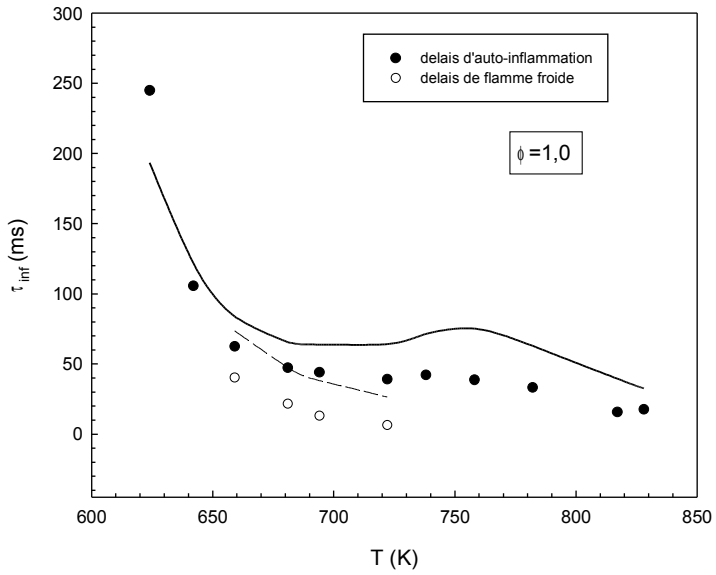


Figure A3-1: Délais d'auto-inflammation de mélanges stœchiométriques n-butylbenzène/O_2/diluant en machine à compression rapide − Confrontation modèle (ligne) -expérience (symboles)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

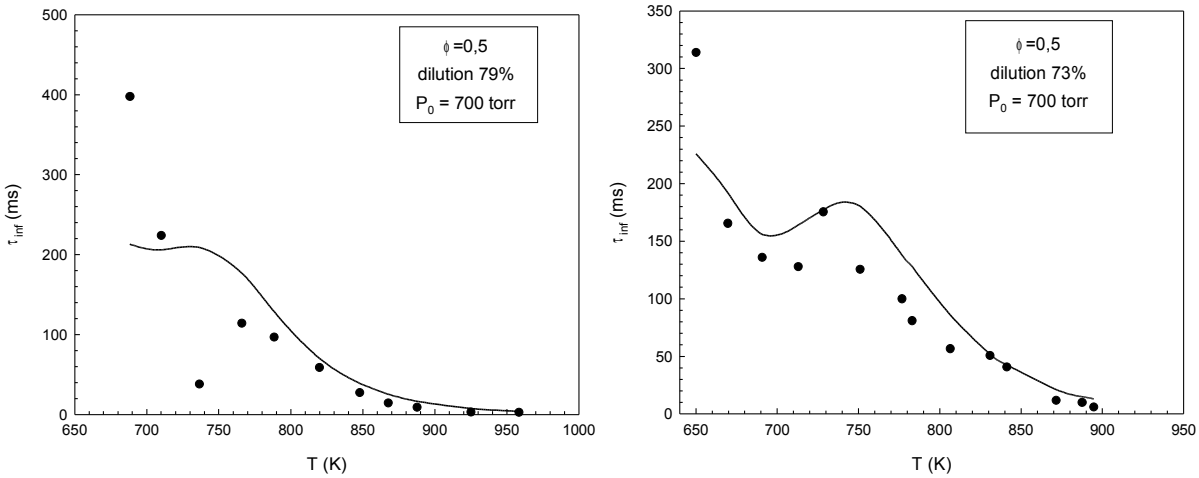


Figure A3-2: Délais d'auto-inflammation de mélanges n-butylbenzène/O_2/diluant (φ=0,50) en machine à compression rapide − Confrontation modèle (ligne) -expérience (symboles)

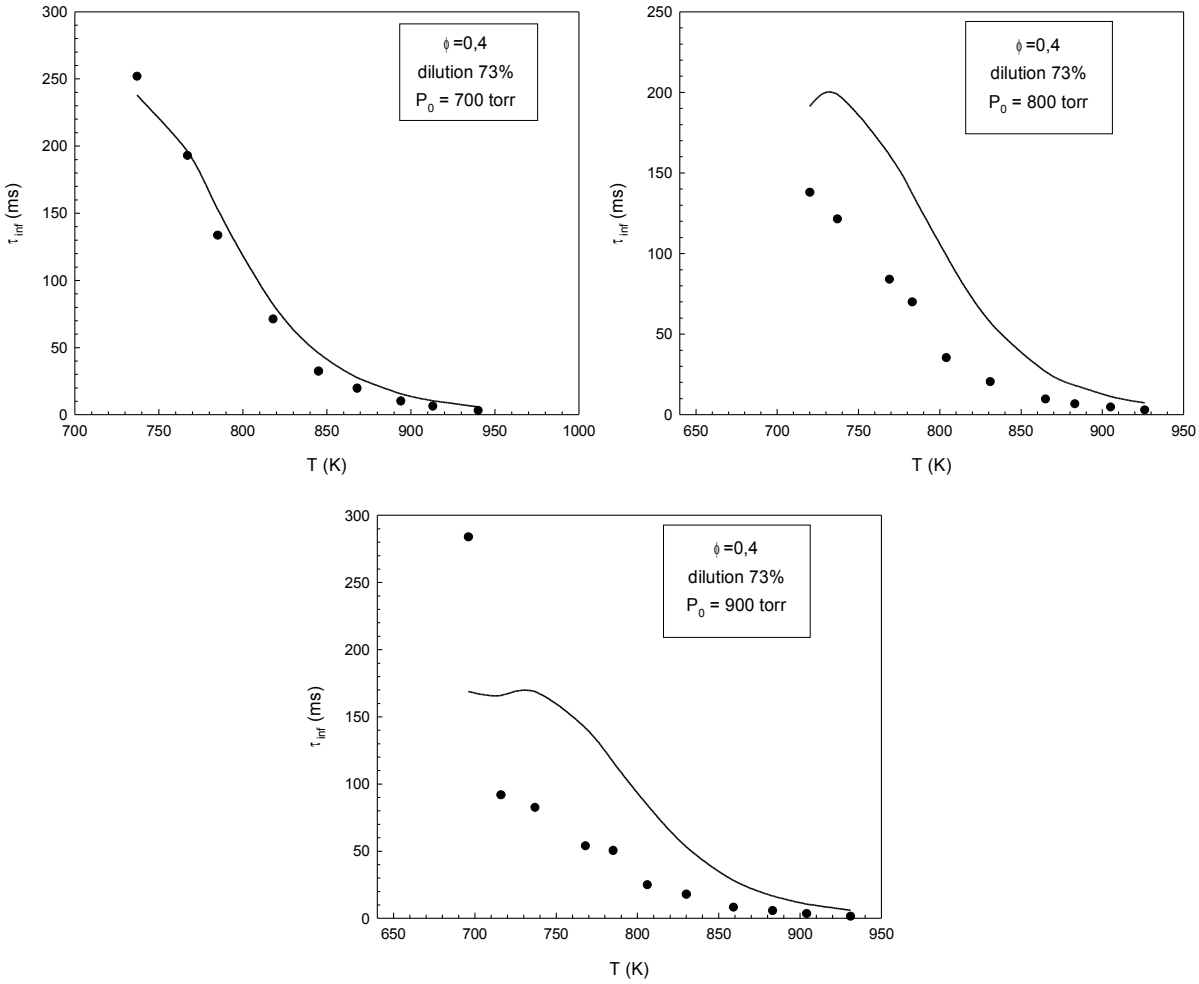


Figure A3-3: Délais d'auto-inflammation de mélanges n-butylbenzène/O_2/diluant (φ=0,40) en machine à compression rapide − Confrontation modèle (ligne) -expérience (symboles)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

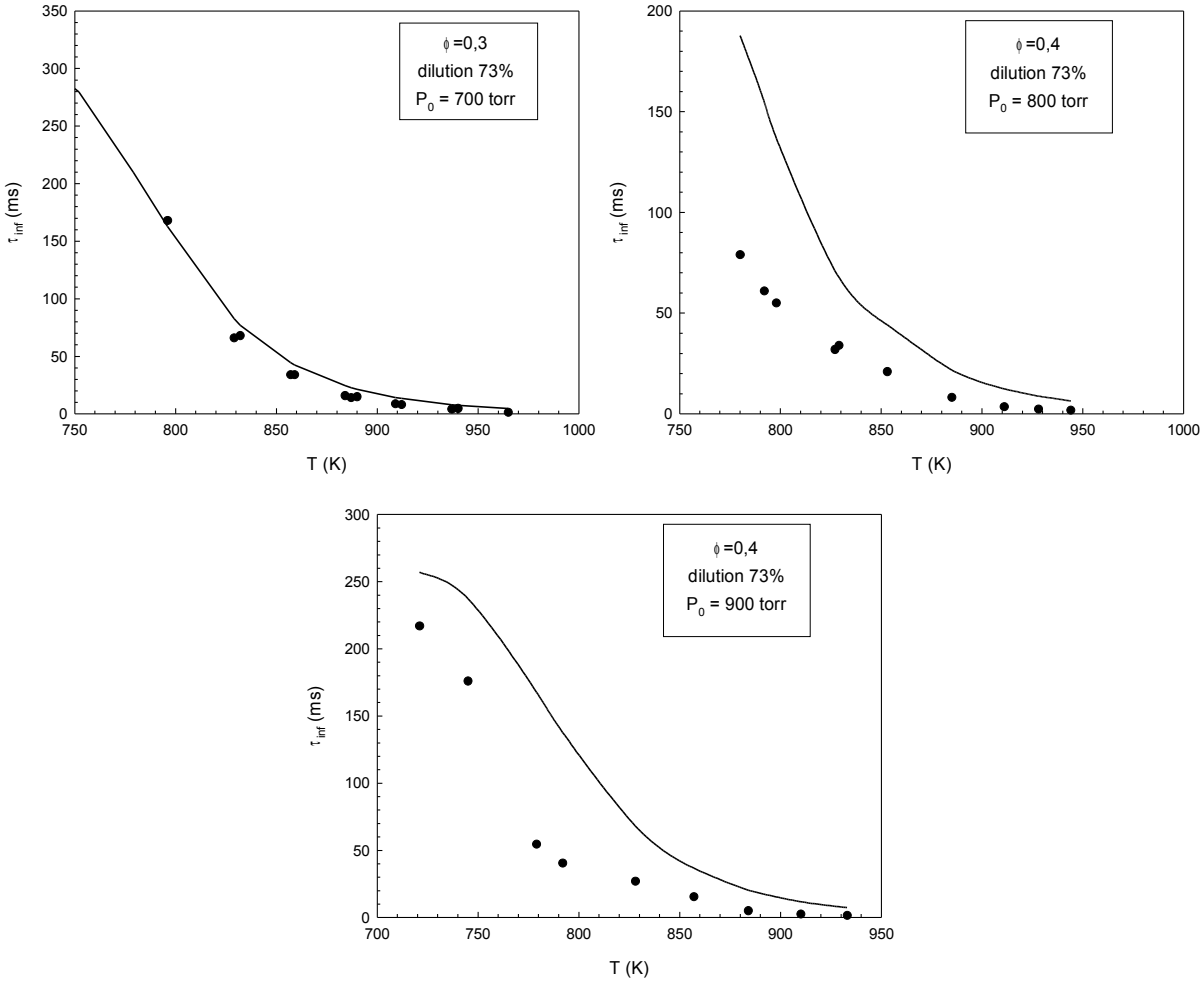


Figure A3-4: Délais d'auto-inflammation de mélanges n-butylbenzène/O_2/diluant (φ=0,30) en machine à compression rapide − Confrontation modèle (ligne) -expérience (symboles)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

© 2009 Tous droits réservés.

http://doc.univ-lille1.fr

ANNEXE 4: DONNÉES THERMODYNAMIQUES DES ESPÈCES PRÉSENTES DANS LE MÉCANISME

$\Delta H_f(298)$: Enthalpie de formation standard à 298 K (en kcal.mol^{-1})

S(298) : Entropie standard à 298 K (en cal.mol^{-1}.K^{-1})

$C_p(300)$: Capacité calorifique à pression constante à 300 K (en cal.mol^{-1}.K^{-1})

$C_p(400)$: Capacité calorifique à pression constante à 400 K (en cal.mol^{-1}.K^{-1})

$C_p(500)$: Capacité calorifique à pression constante à 500 K (en cal.mol^{-1}.K^{-1})

$C_p(600)$: Capacité calorifique à pression constante à 600 K (en cal.mol^{-1}.K^{-1})

$C_p(800)$: Capacité calorifique à pression constante à 800 K (en cal.mol^{-1}.K^{-1})

$C_p(1000)$: Capacité calorifique à pression constante à 1000 K (en cal.mol^{-1}.K^{-1})

$C_p(1500)$: Capacité calorifique à pression constante à 1500 K (en cal.mol^{-1}.K^{-1})

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Annexe 4: Données thermodynamiques des espèces présentes dans le mécanisme

SPECIES	)HF(298	S(298)	CP300	CP400	CP500	CP600	CP800	CP1000	CP1500	formule
H2	0	130,59	28,87	29,12	29,27	29,37	29,58	30,16	32,35	H2
o2	0	205,15	29,39	30,12	31,08	32,08	33,75	34,88	36,5	O2
H2	17,98	114,61	20,78	20,78	20,78	20,78	20,78	20,78	20,78	H
O2	49,19	160,94	21,89	21,5	21,25	21,11	20,98	20,91	20,84	O
oh	37,3	183,73	29,87	29,57	29,48	29,53	29,91	30,69	32,99	HO
ho2	10,46	228,99	34,87	37,43	39,69	41,71	45,1	47,64	52,1	HO2
h2o	-241,84	188,71	33,46	34,43	35,33	36,28	38,58	41,31	47,1	H2O
h2o2	-136,11	232,88	43,57	47,89	51,65	54,85	59,8	63,64	70,5	H2O2
n2	0	191,51	29,07	29,32	29,63	30,08	31,39	32,76	34,8	N2
ar	0	154,73	20,78	20,78	20,78	20,78	20,78	20,78	20,78	AR
co	-110,54	197,55	29,08	29,43	29,85	30,4	31,86	33,25	35,17	CO
co2	-393,54	213,73	37,28	41,27	44,56	47,31	51,54	54,36	58,29	CO2
ch4	-74,89	186,06	35,26	41,19	46,6	51,92	62,75	72,15	86,32	CH4
ch3	145,7	194,05	38,62	42,23	45,33	48,21	53,85	59,07	68,06	CH3
CH2	386,99	195,48	34,5	35,78	37,15	38,6	41,57	44,21	49,11	CH2
sch2	424,72	188,71	33,79	34,72	36	37,58	41,2	44,38	49,48	CH2
CH	594,17	182,93	29,09	29,3	29,49	29,77	30,82	32,56	36,61	CH
C	716,74	158,06	20,84	20,83	20,82	20,81	20,8	20,82	20,8	C10
ch3oh	-201,1	239,65	43,98	51,9	59,64	66,98	79,8	89,53	104,66	CH4O
ch3o	16,3	228,48	37,99	45,13	52,02	58,47	69,58	77,81	90	CH3O
ch2oh	-9	253,67	47,39	54,97	60,73	65,25	72,22	77,5	86,41	CH3O
ch2o	-115,91	218,61	35,15	39,75	43,94	47,99	55,9	62,27	70,99	CH2O
hco	43,52	224,53	34,49	36,74	38,81	40,86	44,93	48,2	52,53	CHO
ch3o2	17,42	263,68	57,68	67,77	76,27	83,45	94,72	102,91	115,39	CH3O2
ch3o2h	-131,08	282,02	65,08	75,72	85,05	93,19	106,36	116,13	131,46	CH4O2
hco3	-337,77	285,72	62,12	70,69	77,51	82,9	90,43	95,04	102,15	CHO3
hco3h	-552,41	292,41	69,53	78,63	86,34	92,7	101,96	108,41	117,27	CH2O3
c2h6	-83,86	228,97	52,61	65,66	77,89	89,1	108,05	122,59	144,83	C2H6
c2h5	117,06	242,37	48,26	61,09	72,3	81,92	96,96	108,25	125,82	C2H5
c2h4	52,46	219,17	42,82	53,49	62,52	70,42	83,9	94,17	109,7	C2H4
c2h3	300,33	235,31	40,58	47,78	54,39	60,32	70,09	77,82	90,8	C2H3
c2h2	226,77	200,91	44,44	50,18	54,73	58,38	63,9	68,23	76,46	C2H2
c2h	560,72	207,38	37,32	40,21	42,7	44,87	48,38	50,97	55,6	C2H
c2	837,82	199,31	42,98	39,71	37,4	36	35,37	36,05	37,35	C20
c2o	286,63	232,98	43,15	46,39	49,04	51,23	54,65	57,15	61,23	C2O
ch3hco	-166,46	263,88	55,24	66	76,15	85,47	101,2	113,06	132,49	C2H4O
ch3co	-10,1	265,78	52,39	59,82	67,99	75,81	88,24	97,35	110,03	C2H3O
ch2hco	13,28	266,25	56,92	66,42	74,5	81,32	91,93	99,91	112,45	C2H3O
ch2co	-51,87	241,81	52,01	59,3	65,54	70,76	78,63	84,7	93,89	C2H2O
Hcco	177,6	254,16	52,93	56,34	59,53	62,44	67,25	70,43	75,24	C2HO
ch3co2	-214,99	271,69	61,86	74,21	84,77	93,76	107,86	118	132,94	C2H3O2
c2h5oh	-234,94	280,59	65,58	80,79	95,55	108,6	128	142,89	165,38	C2H6O
c2h5o	-17,01	269,64	58,37	73,65	86,7	97,84	115,52	128,47	148,29	C2H5O
c2h5o2	-7,67	313,32	76,78	92,1	106,2	118,63	138,03	152,46	174,12	C2H5O2
c2h5o2h	-168,37	323,19	83,36	100,79	115,71	128,4	148,18	162,42	188,7	C2H6O2
c2h4o	-52,65	242,83	48,12	62,6	75,35	86,28	102,97	114,95	132,22	C2H4O
c2h4o2h	30,39	323,74	83,64	98,85	110,91	120,77	136,53	148,96	171,08	C2H5O2
c2h2oh	137,55	274,97	55,19	61,04	67,66	74,22	85,39	94,19	107,88	C2H30
hccoh	85,49	245,64	55,3	61,84	67,62	72,59	80,1	84,94	93,24	C2H2O
chocho	-211,82	273,37	62,41	73,07	82,38	90,11	100,99	108,27	117,55	C2H2O2
choco	-76,68	276,56	62,27	68,64	75,29	81,15	88,75	93,34	98,1	C2HO2
c2h3o	117,51	254,12	49,31	61,62	71,62	79,83	92,4	101,43	116	C2H3O
pc2h4oh	-30,13	295,04	61,45	74,72	86,33	96,48	113,04	125,6	145,32	C2H5O
o2c2h4oh	-172,77	363,83	91,22	105,97	118,97	130,4	149,25	163,77	186,96	C2H5O3
c3h8	-104,11	269,91	73,79	94,54	112,93	129,07	155,24	175,03	208,99	C3H8
nc3h7	100,94	284,11	73,49	92,36	108,19	121,57	143	159,88	193,79	C3H7
ic3h7	90,06	279,01	72,49	89,86	105,26	118,76	140,79	158,39	194,78	C3H7
c3h6	20	266,66	64,71	80,19	95,03	108,28	128,79	144,61	168,44	C3H6
ac3h5	163,59	258,88	63,69	79,45	93,23	104,75	121,58	134,38	153,72	C3H5
tc3h5	255,62	289,77	64,66	76,89	88,75	99,96	119,25	132,23	151,02	C3H5
sc3h5	261,26	271,2	61,51	74,79	86,9	97,58	114,58	127,52	147,83	C3H5
pc3h4	185,32	247,9	61,63	71,5	81,68	91,15	106,08	117,09	132,8	C3H4
ac3h4	190,8	243,06	59,64	71,01	82,07	92	107,23	118,22	133,63	C3H4
c3h3	347,35	256,87	66,36	74,11	81,4	87,87	97,84	105,14	115,7	C3H3
c3h2	445,71	235,24	55,28	63,8	70,92	76,66	84,74	90,49	100,93	C3H2
nc3h7o	-38,37	314,08	83,62	104,19	122,07	137,57	162,52	181,08	209,33	C3H7O
nc3h7oh	-272,87	309,91	89,13	112,43	132,64	149,87	176,54	195,81	230,22	C3H8O
nc3h7o2	-42,18	343,6	98,85	121,93	141,41	157,76	182,92	200,81	229,4	C3H7O2
nc3h7o2h	-212,44	351,9	108,74	133,1	153,66	170,87	197,2	216,13	249,79	C3H8O2
ic3h7o	-56,66	305,71	86,02	107,21	125,33	140,79	165,27	183,26	211	C3H7O
ic3h7o2	-65,56	333,18	101,32	125,18	144,88	161,11	185,58	202,86	230,49	C3H7O2
ic3h7o2h	-207,12	342,91	110,2	135,48	156,85	174,87	202,85	222,9	252,7	C3H8O2
c3h6ooh1-2	5,94	371,68	105,34	126,11	143,29	157,6	179,99	196,84	224,3	C3H7O2
c3h6ooh1-3	15,14	371,02	105,95	127,71	145,43	159,99	182,35	198,79	225,58	C3H7O2
c3h6ooh2-1	-11,16	366,35	108,42	130,97	148,91	163,33	185,01	200,85	226,67	C3H7O2
c3h6ooh1-1	-9,54	371,65	105,64	126,83	143,89	157,87	179,7	196,3	223,43	C3H7O2
c3h6ooh1-2	-146,97	420,14	133,3	160,18	181,93	199,42	224,71	241,71	270,09	C3H7O4
c3h6ooh1-3	-125,86	430,56	130,84	156,91	178,45	196,08	222,07	239,66	269,02	C3H7O4
c3h6ooh2-1	-146,97	420,14	133,28	160,21	181,95	199,41	224,69	241,73	270,09	C3H7O4
c3h6ooh1-1	-160,09	407,08	124,42	152,77	176,11	194,85	220,72	236,38	264,45	C3H7O4
c3ket12	-282,99	379,69	112,28	136,13	155,93	172,29	196,93	213,83	237,65	C3H6O3

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Annexe 4: Données thermodynamiques des espèces présentes dans le mécanisme

ic4h8	-17,16	296,55	88,36	109,14	128,28	145,48	173,73	194,96	227,82	C4H8
ic4h7	121,17	291,49	87,14	108,95	127,33	142,76	166,74	184,73	213,1	C4H7
c4h4o	17,22	280,38	76,85	100,42	121,15	138,57	163,88	181,34	204,78	C4H4O
c3h4hco	101,47	322,83	86,79	107,21	124,2	138,31	159,72	174,64	196,47	C4H5O
c3h3hco	74,57	323,89	77,47	96,42	113,58	129	154,94	174,84	200,12	C4H4O
c3h3co	221,02	313,21	66,93	83,61	99,61	114,48	139,82	158,91	184,54	C4H3O
c4h10	-135,03	291,75	97,01	124	147,93	168,82	202,35	227,66	277,89	C4H0
pc4h9	74,8	324,46	97,43	122,03	143	160,91	189,59	211,76	226,85	C4H9
sc4h9	68,53	325,12	96,81	120,46	140,87	158,51	187,23	209,8	251,73	C4H9
c4h8	-0,54	307,92	85,79	108,43	128,79	146,64	174,97	196	230,5	C4H8
t2c4h8	-10,97	300,64	81,53	103,64	123,93	142,07	171,55	193,41	229,21	C4H8
c2c4h8	-13,55	296,53	86,49	107,73	127,28	144,63	172,25	193,25	226,06	C4H8
Ac4h7-1	245,64	309,97	83,4	104,05	121,61	136,66	160,88	179,06	207,8	C4H7
Cc4h7-1	126,51	295,86	83,77	106,13	125,15	141,29	166,68	185,21	213,84	C4H7
Dc4h7-1	203,8	314,16	85,73	106,92	124,54	139,35	162,87	180,54	208,56	C4H7
c4h6	108,8	277,56	104,9	115,76	127,16	138,06	156,29	170,58	193,08	C4H6
butyne	165,53	290,69	81,47	100,21	115,69	128,72	149,77	166,44	195,75	C4H6
butyn2	146,3	285,35	104,06	114,79	124,77	134,01	150,47	164,43	190,16	C4H6
MEALL	164,59	291,61	80,74	99,01	114,89	128,64	150,78	167,34	190,73	C4H6
ic4h5	310,09	314,68	81,84	96,19	110,61	123,67	143,36	157,24	175,77	C4H5
nc4h5	360,09	305,27	81,51	97,36	113,66	128,36	149,56	163,74	181,11	C4H5
c4h4	289,33	281,77	72,45	86,24	98,83	110,04	127,74	138,89	155,85	C4H4
nc4h3	543,31	288,52	75,58	86,86	97,28	106,28	119,41	128,47	140,41	C4H3
ic4h3	465,64	304,75	84,95	93,41	102,04	109,92	121,8	130,16	141,22	C4H3
c4h2	467,41	250,15	74,24	83,81	91,4	97,22	105,01	111,33	121,19	C4H2
c4h9qjA	-62,88	382,79	121,73	151,02	175,89	196,87	229,27	252,45	290,41	C4H9O2
c4h9qjB	-83,99	378,13	124,18	154,3	179,38	200,21	231,9	254,5	291,49	C4H9O2
c4h8rAqA	-30,24	410,85	128,53	155,91	178,37	196,99	226,06	247,92	284,4	C4H9O2
c4h8rBqA	-14,76	410,88	128,66	156,06	178,53	197,16	226,2	248	284,47	C4H9O2
c4h8rCqA	-14,76	410,89	128,23	155,2	177,77	196,71	226,34	248,48	285,31	C4H9O2
c4h8rDqA	-5,56	410,22	128,84	156,79	179,91	199,1	228,71	250,42	286,58	C4H9O2
c4h8rAqB	-29,6	405,55	131,29	160,09	183,41	202,43	231,33	252,49	287,66	C4H9O2
c4h8rCqB	-35,88	406,21	130,68	158,49	181,27	200,04	228,97	250,54	286,4	C4H9O2
c4h8rDqB	-26,67	405,55	131,28	160,09	183,41	202,43	231,33	252,49	287,64	C4H9O2
c4h8qjAqA	-180,79	446,25	147,75	181,29	210,23	234,17	267,77	287,87	325,4	C4H9O4
c4h8qjBqA	-165,41	465,07	156,16	189,31	216,44	238,52	271,03	293,35	331,03	C4H9O4
c4h8qjCqA	-167,67	465,08	156,16	189,31	216,44	238,52	271,03	293,35	331,01	C4H9O4
c4h8qjDqA	-146,55	463,97	153,74	185,99	212,92	235,19	268,44	291,28	329,93	C4H9O4
c4h8qjAqB	-165,41	459,31	156,17	189,3	216,44	238,52	271,03	293,35	331,03	C4H9O4
c4h8qjCqB	-188,79	454,64	158,66	192,54	219,9	241,87	273,73	295,41	332,1	C4H9O4
c4h8qjDqB	-167,67	465,07	156,16	189,31	216,44	238,51	271,03	293,36	331,01	C4H9O4

c3ket13	-267,8	380,11	114,28	135,08	152,89	168,11	192,15	209,65	235,23	C3H6O3
c3ket21	-298,39	380,49	113,4	133,15	150,54	165,78	190,55	208,93	235,12	C3H6O3
c3h6o	-92,99	286,73	72,44	90,99	107,63	122,64	148,21	167,32	195,21	C3H6O
c3h6o1-3	-76,82	271,36	65,65	88,12	107,55	124,23	150,41	168,73	192,03	C3H6O
c3h5o	92,54	300,26	71,82	87,51	101,93	114,68	134,81	149,97	173,26	C3H5O
c3h4oh	81,26	315,88	79,69	94,77	107,61	118,55	135,84	148,56	168,66	C3H5O
c3h4o2h	178,51	349,65	97,01	113,39	127,64	140	159,89	174,62	196,46	C3H5O2
c3h4o	25,61	270,34	58,69	74,82	89,01	101,32	120,57	133,16	139,58	C3H4O
c3h3o	163,69	260,35	60,11	75,76	89,01	100,15	117,1	128,49	142,63	C3H3O
c3h5o2h	-58,1	347,63	95,19	116,09	133,54	147,97	169,61	184,79	211,61	C3H6O2
c3h5e1q2	-64,74	339,78	101,16	122,44	139,68	153,65	174,5	189,66	216,31	C3H6O2
c3h5oq	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C3H6O3
ethco	-185,92	304,41	81,35	97,74	112,52	125,69	147,43	163,95	191,87	C3H6O
c2h5co	-36,02	308,03	76,43	90,04	104,39	118,33	141,91	157,58	191,06	C3H5O
c2h5co3	-188,79	454,64	158,66	192,54	219,9	241,87	273,73	295,41	332,1	C3H5O3
aceton	-217,8	294,93	74,92	92,49	108,34	122,5	146,02	163,94	193,31	C3H6O
acrol	-74,82	296,98	77,12	94,37	109,9	124,11	148,99	167,61	179,68	C3H4O
c2h3co	-188,79	454,64	158,66	192,54	219,9	241,87	273,73	295,41	332,1	C3H3O
ch2coch3	-33,34	307,51	73,11	87,78	101,58	113,7	132,07	146,07	167,28	C3H5O
c3h5oh	-203,19	392,81	128,61	156,89	182,07	204,08	239,1	264,3	308	C3H6O
c3h6oh	-52,68	336,55	84,48	104,69	121,94	136,64	159,84	176,87	203,58	C3H7O
o2c3h6oh	-183,94	382,12	112,55	136,12	156,49	174,05	202,11	222,76	253,21	C3H7O3
ch3chco	-6	151,14	44,29	54,45	63,69	72,05	86,25	97,36	113,76	C3H4O
ch2ch2hco	18,83	324,37	77,78	92	104,64	115,83	134,31	148,34	169,44	C3H5O
qjch2ch2hC	-125,47	372,91	104,25	124,41	140,94	154,47	174,76	189,5	226,54	C3H5O3
qch2chhco	-104,15	382,87	111,24	130,25	145,34	157,45	175,71	189,6	225,74	C3H5O3
qqjch2chhC	-154	448,58	135,29	160,81	181,03	196,82	218,58	232,64	273,9	C3H5O5
qch2ch2co	-124,64	397,69	107,58	125,34	139,98	152,09	170,75	184,86	221,41	C3H5O3
qch2ch2co3	-298,59	439,4	123,01	149,91	171,03	187,45	210,28	226,36	284,98	C3H5O5
ch3cocho	-269,81	328,1	79,76	96,16	110,48	122,91	142,77	157,04	176,43	C3H4O2
ch3coco	-140,51	322,28	78,99	92,42	103,98	113,87	129,44	140,56	156,05	C3H3O2
ch2cohco	-92,81	323,24	81,32	96,85	109,81	120,56	136,72	147,6	162,01	C3H3O2
hcoch2hco	-280,52	335,5	74,28	91,31	106,24	119,22	140	154,93	174,65	C3H4O2
hcoch2co	-132,81	347,3	70,14	84,4	96,63	107,06	123,45	135,17	151,54	C3H3O2
ch3coch2o2	-148,04	387,64	107,4	122,9	136,76	149,12	169,84	186,02	211,47	C3H5O3
ch3coch2o	-141,05	336,63	88,83	104,7	118,97	131,71	152,94	169,11	192,94	C3H5O2
ch3coch2o2	-299,1	386,72	115,96	135,04	151,67	166,13	189,5	206,88	232,77	C3H6O3
propynal	14,77	182,02	72,03	83,61	92,7	99,76	109,33	114,98	121,96	C3H2O
c2hco	164,99	177,38	66,1	75,31	82,59	88,28	96,08	100,75	106,48	C3HO
ic4h9	70,32	315,89	94,12	119,63	141,5	160,4	191,03	212,85	246,19	C4H9
tc4h9	46,19	306,18	92,73	114,43	134,8	153,42	184,67	208,26	243,23	C4H9

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Annexe 4: Données thermodynamiques des espèces présentes dans le mécanisme

c4h8o#3	-138,83	295,44	101,83	129,31	153,09	173,26	203,89	224,71	259,26	C4H8O
c4h8o#4	-124,41	305,68	87,73	118,76	143,9	165,08	200,89	232,04	276,04	C4H8O
c4h8o#5	-184,18	302,41	76,75	105,32	133,05	157,3	192,12	217,72	254,02	C4H8O
c4h7oAqB	-305,68	425,24	133,59	162,86	187,23	207,34	237,43	258,64	308,47	C4H8O3
c4h7oAqC	-314,17	426,08	137,03	164,67	187,67	206,69	235,42	256,43	310,61	C4H8O3
c4h7oAqD	-293,05	430,76	134,52	161,47	184,22	203,31	232,73	254,34	303,75	C4H8O3
c4h7oBqA	-319,1	425,4	135,43	161,59	183,68	202,26	231,2	253,15	307,47	C4H8O3
c4h7oBqC	-335,58	421,54	130,83	160,19	184,8	205,26	236,15	257,97	306,02	C4H8O3
c4h7oBqD	-322,95	427,06	131,78	158,77	181,77	201,22	231,46	253,65	301,12	C4H8O3
nc4h9o2h	-230,88	396,82	131,61	162,21	188,16	209,98	243,52	267,77	310,68	C4H0O2
c4h7o2h	-100,3	387,62	121,9	148,55	171,33	190,41	218,93	238,48	273,6	C4H8O2
c4h7e1qB	-96,98	375,43	124,31	149,95	171,8	190,29	218,93	239,77	276,19	C4H8O2
c4h7oq	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C4H8O3
nc3h7hco	-206,83	352,87	103,55	126,66	147,06	164,94	193,79	214,65	241,87	C4H8O
c3h7co	-188,79	454,64	158,66	192,54	219,9	241,87	273,73	295,41	332,1	C4H7O
c3h7co3	-188,79	454,64	158,66	192,54	219,9	241,87	273,73	295,41	332,1	C4H7O3
c4h7oh	-203,19	392,81	128,61	156,89	182,07	204,08	239,1	264,3	308	C4H8O
ac3h5hco	-75,53	337,6	87,91	109,29	127,65	143,37	168,24	186,34	213,23	C4H6O
ac3h5co	78,88	342,28	84,43	103,29	119,46	133,26	155	170,72	193,83	C4H5O
c2h3chcho	64,65	321,65	81,31	101,67	119,02	133,74	156,79	173,37	198,07	C4H5O
c4h8o2	-203,19	392,81	128,61	156,89	182,07	204,08	239,1	264,3	308	C4H8O2
butanone	-238,66	338,11	102,93	125,3	145,4	163,26	192,67	214,94	252,51	C4H8O
MVK	-106,52	332,31	89,21	108,33	125,56	140,88	165,85	183,24	192,65	C4H6O
ch2coc2h3	49,79	325,71	90,29	110,91	128,03	142,21	163,65	178,54	200,4	C4H5O
MHD	0	191,51	29,07	29,32	29,63	30,08	31,39	32,76	34,8	C7H2
h2c4o	228,31	277,54	72,31	81,94	91,21	99,44	111,81	120,55	132,43	C4H2O
c4h	648,91	254,81	58,99	64,3	69,29	73,91	81,97	88,48	98,08	C4H
c4h6o2h	0	154,73	20,78	20,78	20,78	20,78	20,78	20,78	20,78	C4H7O2
hoc4h6	-23,53	346,12	95,61	117,85	136,96	153,36	179,54	198,87	232,26	C4H7O
ch3chch2hC	-14,38	353,2	101,64	122,7	140,26	155,09	179,05	198,32	240,28	C4H7O
ch2ch2ch2hco	-1,8	363,79	100,75	121,17	139,13	154,88	180,59	199,94	229.21	C4H7O
ch3coc2h4	-34,46	346,77	102,63	123,17	140,64	155,71	180,49	199,63	225,9	C4H7O
c2h5coch2	-61,01	337,72	102,45	124,72	143,9	160,37	186,58	205,78	234,18	C4H7O
ch3coc2h4q	-176,07	408,4	124,34	150,87	173,02	191,47	219,8	240,46	285,31	C4H7O3
ch2coc2h4q	-129,64	423,34	130,63	156,76	178,29	196,03	223,05	242,82	286,53	C4H7O3
ch2qjcoc2h	-255,89	487,91	160,01	188,64	211,95	230,84	258,69	278,74	334,39	C4H7O5
c4e1ojC	54,06	336,09	97,01	122,96	144,64	162,67	189,94	208,61	235,04	C4H7O
c2h5coch2q	-172,22	406,74	128,04	153,63	174,89	192,52	219,57	239,92	291,79	C4H7O3
ch3chcoch2	-150,89	416,69	134,68	158,7	178,58	195,07	220,67	240,52	291,79	C4H7O3
ch3chqjcoC	-268,52	488,16	159,05	190,07	214,99	234,86	263,37	283,08	339,25	C4H7O5
c4h7hco-1	-101,3	376,09	115,12	141,23	163,79	183,21	214,18	236,86	270,62	C5H8O

c4h7co-1	53,1	380,78	111,66	135,24	155,6	173,11	200,98	221,33	251,43	C5H7O
c5h12	-154,87	343,59	119,32	152,93	182,66	208,58	250	280,89	336,48	C5H12
Ac5h11	57,37	363,37	120,29	151,1	177,43	199,95	235,96	263,3	311,08	C5H11
Bc5h11	48,16	364,03	119,67	149,51	175,3	197,57	233,57	261,41	312,58	C5H11
Cc5h11	48,22	357,32	119,59	150,08	175,96	198,01	233,37	260,86	312,14	C5H11
c5h10	-21,28	347,11	108,71	136,9	163,53	186,77	221,09	246,5	284,54	C5H10
c2c5h10	-26,55	345,37	102,31	132,23	158,7	181,55	217,31	244,15	285,7	C5H10
t2c5h10	-31,57	339,51	102,31	132,23	158,7	181,55	217,31	244,15	285,7	C5H10
Dc5h9-1	173,53	353,34	108,33	134,82	157,33	176,57	207,51	230,86	267,28	C5H9
Ac5h9-1	218,72	348,48	106,6	133,5	156,52	176,27	207,89	231,31	267,79	C5H9
Bc5h9-1	217	364,13	107,62	133,59	156,25	175,97	207,91	231,79	268,28	C5H9
Cc5h9-1	116,7	347,01	106,79	133,83	157,68	177,87	207,96	230,94	266,14	C5H9
Ec5h9-1	183,95	367,47	105,85	132,93	156,32	176,48	208,71	232,5	268,71	C5H9
Dc5h9-2	91,85	337,4	105,85	133,39	157,5	178,15	210,22	234,1	270,72	C5H9
c5h11qjA	-83,57	421,97	144,65	180,07	210,35	235,99	275,65	304,06	351,36	C5H11O2
c5h11qjB	-104,69	417,32	147,9	182,33	213,17	239,73	279,54	305,88	352,43	C5H11O2
c5h11qjC	-102,43	411,55	147,91	182,32	213,17	239,73	279,55	305,87	352,43	C5H11O2
c5h10rAqA	-50,94	450,04	151,45	184,96	212,82	236,1	272,44	299,53	345,38	C5H11O2
c5h10rBqA	-35,46	450,07	151,57	185,12	213	236,27	272,57	299,62	345,43	C5H11O2
c5h10rCqA	-35,46	450,07	151,56	185,13	213,01	236,27	272,56	299,62	345,43	C5H11O2
c5h10rDqA	-35,46	450,07	151,13	184,28	212,25	235,83	272,71	300,1	346,26	C5H11O2
c5h10rEqA	-26,25	449,41	151,75	185,86	214,38	238,22	275,08	302,04	347,53	C5H11O2
c5h10rAqB	-50,3	444,73	155,03	188,08	217,18	241,96	278,99	303,83	348,61	C5H11O2
c5h10rBqB	-80,42	441,6	154,32	185,95	213,86	237,79	274,22	299,59	345,31	C5H11O2
c5h10rCqB	-56,57	445,39	154,83	187,36	215,82	240,01	276,47	301,43	346,5	C5H11O2
c5h10rDqB	-56,57	445,4	154,42	186,49	215,04	239,57	276,62	301,89	347,33	C5H11O2
c5h10rEqB	-47,37	444,73	155,04	188,07	217,17	241,97	279	303,82	348,61	C5H11O2
c5h10rAqC	-45,11	444,73	155,04	188,07	217,17	241,97	279	303,82	348,61	C5H11O2
c5h10rBqC	-54,31	445,4	154,42	186,49	215,04	239,57	276,62	301,89	347,33	C5H11O2
c5h10qjAqA	-201,48	485,42	170,66	210,35	244,69	273,29	314,14	339,48	386,36	C5H11O4
c5h10qjBqA	-186,11	498,47	179,92	217,29	250,2	278,05	318,71	344,7	391,94	C5H11O4
c5h10qjCqA	-186,11	498,48	179,91	217,3	250,21	278,05	318,71	344,71	391,94	C5H11O4
c5h10qjDqA	-188,37	498,49	179,9	217,3	250,21	278,05	318,7	344,71	391,94	C5H11O4
c5h10qjEqA	-167,25	508,9	176,64	215,07	247,4	274,31	314,8	342,91	390,86	C5H11O4
c5h10qjAqB	-186,11	498,47	179,92	217,29	250,2	278,05	318,71	344,7	391,94	C5H11O4
c5h10qjBqB	-218,89	469,44	171,28	211,63	246,85	276,35	318,91	346,49	397,62	C5H11O4
c5h10qjCqB	-207,22	499,56	181,56	221,61	254,37	280,98	320,07	347,01	393,02	C5H11O4
c5h10qjDqB	-209,48	499,57	181,55	221,62	254,38	280,98	320,06	347,02	393,02	C5H11O4
c5h10qjEqB	-188,37	498,47	179,91	217,29	250,2	278,05	318,71	344,7	391,94	C5H11O4
c5h10qjAqC	-186,11	504,23	179,91	217,29	250,2	278,05	318,71	344,7	391,94	C5H11O4
c5h10qjBqC	-207,22	493,81	181,55	221,62	254,38	280,98	320,06	347,02	393,02	C5H11O4

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

c5h9oAqA	-403,19	455,2	144,17	181,09	211,75	237,07	275,46	304	380,53	C5H10O3
c5h9oAqB	-326,38	464,39	156,46	191,98	221,73	246,44	283,77	310,26	369,87	C5H10O3
c5h9oAqC	-332,61	465,23	159,91	193,77	222,16	245,78	281,76	308,03	372,04	C5H10O3
c5h9oAqD	-334,87	465,23	159,89	193,8	222,17	245,77	281,75	308,06	372,02	C5H10O3
c5h9oAqE	-313,75	469,91	157,39	190,59	218,72	242,4	279,07	305,96	365	C5H10O3
c5h9oBqA	-339,8	464,55	158,31	190,7	218,17	241,36	277,54	304,76	368,94	C5H10O3
c5h9oBqC	-356,28	460,69	153,7	189,3	219,29	244,35	282,48	309,59	367,39	C5H10O3
c5h9oBqD	-364,77	461,54	157,15	191,11	219,73	243,69	280,47	307,37	369,55	C5H10O3
c5h9oBqE	-343,65	466,21	154,62	187,92	216,29	240,31	277,78	305,29	362,76	C5H10O3
c5h9oCqA	-344,86	466,63	156,78	190,26	218,26	241,59	277,5	304,74	377,52	C5H10O3
c5h9oCqB	-357,49	461,12	155,83	191,68	221,3	245,62	282,18	309,07	382,23	C5H10O3
c5h10o#3	-157,27	346,11	124,71	158,42	187,58	212,36	250,22	276,34	320,18	C5H10O
c5h10o#4	-166,22	322,87	113,11	151,09	181,85	207,55	249,91	285,73	338,97	C5H10O
c5h10o#5	-225,86	330,19	130,69	166,81	196,31	220,44	256,95	283,57	327,22	C5H10O
c5h10o#6	-227,34	312,27	129	162,55	192,18	217,48	255,48	281,24	326,09	C5H10O
Ac5h9o#5	-58,89	335,39	129,37	163,02	190,36	212,45	245,12	269,28	340,81	C5H9O
Dc5h9o#5	-58,89	331,59	129,26	162,49	189,18	210,66	242,72	266,99	338,88	C5H9O
nc5h11o2h	-249,32	430,2	155,33	190,23	221,94	249,5	291,17	319,13	371,59	C5H12O2
c5h9o2h	-132,55	423,28	144,82	176,33	203,63	226,94	263,03	288,66	333,51	C5H10O2
c5h9e2qC	-118	413,68	144,85	178,49	206,64	230,07	265,84	291,88	337,56	C5H10O2
nc4h9hco	-230,07	383,02	125,4	155,61	181,66	204,07	239,96	267,15	313,74	C5H10O
nc4h9co	-188,79	454,64	158,66	192,54	219,9	241,87	273,73	295,41	332,1	C5H9O
pentanone	-259,97	379,33	122,64	152,93	179,23	201,99	238,66	266,49	313,92	C5H10O
c2h5coc2h4	-54,82	384,51	115,76	145,75	170,98	192,33	226,14	251,02	288,66	C5H9O
c2h5coc2h4	-197,97	448	149,37	182,32	209,49	231,85	265,85	291,53	362,27	C5H9O3
ch3chcoc2h	-176,65	458,04	156,05	187,36	213,16	234,41	266,97	292,1	362,3	C5H9O3
ch3chqjcoc2h4q	-294,28	523,65	180,41	218,73	249,57	274,19	309,66	334,67	409,69	C5H9O5
etvinket	-128,43	371,88	112,3	137,34	159,88	179,9	212,35	234,69	246,6	C5H8O
c2h3coc2h4	55,57	381,66	111,6	136,08	156,95	174,71	202,75	223,31	254,65	C5H7O
divinket	-40,75	339,77	103,15	128,07	148,79	166,02	192,41	211,3	240,96	C5H6O
c5h9oh	-203,19	392,81	128,61	156,89	182,07	204,08	239,1	264,3	308	C5H0O
c5h10qj	-203,19	392,81	128,61	156,89	182,07	204,08	239,1	264,3	308	C5H0O2
c5h8-12	142,3	329,98	102,74	127,73	149,48	168,25	197,99	219,39	252,68	C5H8
c5h8-13	75,96	319,01	102,1	128,95	151,22	169,71	198,12	219,25	252,21	C5H8
c5h8-14	106,33	334,67	97,16	123,87	146,55	165,76	195,85	217,64	250,94	C5H80
c5h7	221,52	311,42	98,32	123,81	146,95	166,63	194,73	213,71	238,07	C5H7
Ac5oB	-81,64	392,04	125,5	154,01	178,49	199,48	232,83	257,35	294,53	C5H9O
c5oBqjA	-192,91	445,91	150,88	182,78	209,41	231,6	265,89	291,56	353,25	C5H9O3
Cc5oBqA	-171,59	454,32	158,04	188,69	213,85	234,64	266,87	291,66	352,46	C5H9O3
c5oBqAqjC	-289,22	521,55	181,94	219,16	249,47	273,96	309,71	334,68	400,52	C5H9O5
Ec5oB	-55,77	388,05	122,35	150,75	174,47	194,48	226,45	251,23	300,59	C5H9O

c5oBqjE	-196,77	447,57	147,22	179,97	207,51	230,57	266,14	292,07	346,9	C5H9O3
Cc5oBqE	-175,44	455,8	154,36	185,91	211,97	233,59	267,11	292,19	346,14	C5H9O3
c5oBqEqjC	-293,07	523,22	179,04	215,57	246,78	273	311,71	334,15	332,8	C5H9O5
c5e1qjE	41,73	412,24	133,81	165,64	192,5	215,04	249,59	273,68	314,14	C5H9O2
Cc5e1qE	26,66	425,63	137,77	167,55	192,94	214,48	248	271,81	312,5	C5H9O2
c5e1qEqjC	-55,53	489,28	169,32	204,8	234,08	257,99	292,9	315,52	354,51	C5H9O4
c5e1oEqC	-202,03	456,04	150,03	180,33	205,47	226,13	256,91	278,79	333,93	C5H8O3
ISOPH	67,54	348,18	110,02	137,13	159,96	179,35	210,28	233,37	268,71	C5H9
ISOPE	74,69	315,22	105,75	133,02	155,08	173,1	200,69	221,19	253,5	C5H8
ISOPY	316,49	342,28	102,75	123,09	142,1	158,89	184,76	203,65	231,04	C5H7
c6h14	-180,85	359,69	142,66	182,27	217,16	247,47	295,78	331,5	395,32	C6H4
Ac6h13	36,55	402,88	143,31	180,17	211,86	239,03	282,32	314,91	372,03	C6H3
Bc6h13	27,34	403,54	142,69	178,58	209,74	236,66	279,92	313,02	373,56	C6H3
Cc6h13	27,34	403,54	143,1	179,45	210,51	237,1	279,77	312,56	372,73	C6H3
c6h12	-41,95	386,35	131,42	165,82	198,28	226,43	267,21	296,8	340,88	C6H2
Cc6h11-1	98,46	370,91	125,71	160,33	190,22	215,93	256,88	286,87	331,41	C6H10
Fc6h11-1	163,32	406,89	128,72	162,08	190,86	215,61	255,07	284,09	328,09	C6H10
Ac6h11-3	151,73	414,13	126,27	159,83	188,82	213,78	253,68	283,13	327,89	C6H10
c6h10-13	58,51	372,67	121,14	151,29	178,74	202,46	238,32	265,64	306,93	C6H10
c6h10-15	84,29	373,29	120,43	153,05	180,93	204,48	240,82	267,81	309,38	C6H10
c6h9	211,07	373,3	118	149,69	176,36	198,59	232,33	256,98	294,02	C6H9
c6h13qjA	-104,27	461,15	167,55	209,15	244,82	275,11	322,02	355,68	412,29	C6H3O2
c6h13qjB	-125,38	456,49	170,81	211,39	247,64	278,85	325,91	357,49	413,38	C6H3O2
c6h13qjC	-123,13	456,48	170,81	211,38	247,64	278,85	325,92	357,48	413,38	C6H3O2
c6h12rAqA	-71,63	489,22	174,33	214,06	247,31	275,21	318,8	351,17	406,34	C6H3O2
c6h12rBqA	-56,15	489,25	174,46	214,2	247,48	275,39	318,93	351,25	406,38	C6H3O2
c6h12rCqA	-56,15	489,25	174,46	214,2	247,48	275,39	318,93	351,25	406,38	C6H3O2
c6h12rDqA	-56,15	489,25	174,48	214,18	247,46	275,39	318,94	351,23	406,37	C6H3O2
c6h12rEqA	-56,15	489,25	174,05	213,33	246,7	274,95	319,09	351,71	407,21	C6H3O2
c6h12rFqA	-46,95	488,59	174,65	214,93	248,85	277,33	321,45	353,66	408,47	C6H3O2
c6h12rAqB	-70,99	483,91	177,92	217,18	251,67	281,07	325,35	355,47	409,56	C6H3O2
c6h12rBqB	-101,12	480,78	177,21	215,03	248,34	276,9	320,58	351,22	406,23	C6H3O2
c6h12rCqB	-77,27	484,57	177,72	216,45	250,29	279,12	322,83	353,06	407,45	C6H3O2
c6h12rDqB	-77,27	484,57	177,72	216,45	250,29	279,12	322,83	353,06	407,44	C6H3O2
c6h12rEqB	-77,27	484,58	177,3	215,58	249,53	278,69	322,98	353,52	408,3	C6H3O2
c6h12rFqB	-68,07	483,91	177,94	217,15	251,65	281,08	325,36	355,45	409,53	C6H3O2
c6h12rAqC	-65,81	483,91	177,94	217,15	251,65	281,08	325,36	355,45	409,53	C6H3O2
c6h12rBqC	-75,01	484,58	177,3	215,58	249,53	278,69	322,98	353,52	408,3	C6H3O2
c6h12rCqC	-98,86	480,78	177,63	215,9	249,11	277,34	320,43	350,75	405,41	C6H3O2
c6h12rDqC	-75,01	484,57	177,72	216,45	250,29	279,12	322,83	353,06	407,44	C6H3O2
c6h12rEqC	-75,01	484,58	177,3	215,58	249,53	278,69	322,98	353,52	408,3	C6H3O2

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

c5h11hco	-248,84	422,88	148,62	184,52	216,16	243,67	287,51	319,77	375,4	C6H12O
c5h11co	-188,79	454,64	158,66	192,54	219,9	241,87	273,73	295,41	332,1	C6H11O
hexanone	-280,67	418,48	145,53	182,01	213,71	241,1	285	318,1	374,81	C6H12O
c6h7C	235,34	295,93	112,62	144,72	169,72	189,41	218,27	238,72	268,76	C6H7
Lc6h7	411,45	346,39	115,08	144,06	167,21	185,55	211,22	227,01	256,6	C6H7
Lc6h6	345,73	340,53	110,84	137,61	159,46	176,97	201,37	215,83	241,56	C6H6
Lc6h4	526,06	333,39	103,93	126,1	144,01	158,17	177,32	187,93	205,91	C6H4
U-c6h5	589,8	332,85	112,53	133,34	151,76	167,55	191	204,74	225,64	C6H5
c7h16	-188,31	427,9	166,56	211,43	251,09	285,64	340,81	381,73	455,16	C7H16
Ac7h15	15,89	442,42	166,26	209,28	246,33	278,11	328,63	366,45	432,67	C7H15
Bc7h15	6,69	443,08	165,65	207,68	244,2	275,73	326,23	364,55	434,23	C7H15
Cc7h15	6,69	443,08	166,07	208,54	244,96	276,18	326,08	364,08	433,39	C7H15
Dc7h15	6,69	437,32	166,07	208,54	244,96	276,18	326,08	364,08	433,39	C7H15
c7h14	-62,76	425,6	154,23	194,82	233,06	266,08	313,34	347,08	397,18	C7H14
c7h12-13	34,99	399,49	146,78	186,42	220,27	248,86	292,63	322,76	371,9	C7H12
c7h12-16	63,81	419,19	143,23	182,22	215,53	243,92	288,61	321,05	370,09	C7H12
Cc7h13-1	130,39	442,84	150,45	189,4	223,21	252,45	299,4	334,13	386,64	C7H13
Dc7h13-1	131,6	453,97	148,29	187,15	221,1	250,61	298,17	333,2	385	C7H13
Ac7h13-3	131,1	453,55	149,16	188,99	223,35	252,9	300,04	334,72	387,28	C7H13
c7h15qjA	-124,96	500,32	190,44	238,23	279,3	314,22	368,38	407,32	473,21	C7H15O2
c7h15qjB	-146,08	495,66	193,73	240,44	282,1	317,97	372,29	409,09	474,27	C7H15O2
c7h15qjC	-143,82	495,65	193,71	240,46	282,11	317,96	372,28	409,11	474,3	C7H15O2
c7h15qjD	-143,82	489,89	193,71	240,47	282,11	317,96	372,28	409,12	474,3	C7H15O2
c7h14rAqA	-92,33	528,39	197,24	243,12	281,78	314,34	365,17	402,78	467,26	C7H15O2
c7h14rBqA	-76,85	528,42	197,36	243,27	281,95	314,51	365,3	402,87	467,32	C7H15O2
c7h14rCqA	-76,85	528,42	197,36	243,27	281,95	314,51	365,3	402,87	467,32	C7H15O2
c7h14rDqA	-76,85	528,42	197,35	243,29	281,96	314,5	365,29	402,89	467,28	C7H15O2
c7h14rEqA	-76,85	528,42	197,35	243,29	281,96	314,5	365,29	402,89	467,28	C7H15O2
c7h14rFqA	-76,85	528,42	196,93	242,42	281,19	314,06	365,45	403,35	468,15	C7H15O2
c7h14rGqA	-67,64	527,76	197,55	244	283,32	316,45	367,82	405,29	469,4	C7H15O2
c7h14rAqB	-91,69	523,09	200,82	246,24	286,13	320,19	371,72	407,09	470,48	C7H15O2
c7h14rBqB	-121,81	519,95	200,14	244,08	282,8	316,02	366,96	402,82	467,16	C7H15O2
c7h14rCqB	-97,96	523,75	200,63	245,52	284,76	318,24	369,2	404,68	468,38	C7H15O2
c7h14rDqB	-97,96	523,75	200,61	245,54	284,78	318,23	369,19	404,7	468,39	C7H15O2
c7h14rEqB	-97,96	523,75	200,61	245,54	284,78	318,23	369,19	404,7	468,39	C7H15O2
c7h14rFqB	-97,96	523,75	200,18	244,69	284,02	317,79	369,33	405,18	469,19	C7H15O2
c7h14rGqB	-88,76	523,09	200,82	246,24	286,13	320,19	371,72	407,09	470,47	C7H15O2
c7h14rAqC	-86,5	523,09	200,82	246,24	286,13	320,19	371,72	407,09	470,47	C7H15O2
c7h14rBqC	-95,71	523,75	200,18	244,69	284,02	317,79	369,33	405,18	469,19	C7H15O2
c7h14rCqC	-119,55	519,95	200,55	244,96	283,57	316,46	366,8	402,36	466,33	C7H15O2
c7h14rDqC	-95,71	523,75	200,61	245,54	284,78	318,23	369,19	404,7	468,39	C7H15O2
c6h12rFqC	-65,81	483,91	177,94	217,15	251,65	281,08	325,36	355,45	409,53	C6H3O2
c6h12qjAqA	-222,18	524,58	193,55	239,44	279,17	312,4	360,5	391,12	447,25	C6H3O4
c6h12qjBqA	-206,8	537,64	202,83	246,35	284,66	317,17	365,08	396,31	452,82	C6H3O4
c6h12qjCqA	-206,8	543,4	202,83	246,35	284,66	317,17	365,08	396,31	452,82	C6H3O4
c6h12qjDqA	-206,8	543,4	202,81	246,37	284,68	317,16	365,07	396,33	452,82	C6H3O4
c6h12qjEqA	-209,06	543,41	202,82	246,36	284,67	317,16	365,08	396,32	452,82	C6H3O4
c6h12qjFqA	-187,95	542,31	199,54	244,14	281,87	313,42	361,17	394,53	451,79	C6H3O4
c6h12qjAqB	-206,8	537,64	202,83	246,35	284,66	317,17	365,08	396,31	452,82	C6H3O4
c6h12qjBqB	-239,59	508,61	194,18	240,7	281,31	315,47	365,28	398,1	458,53	C6H3O4
c6h12qjCqB	-227,92	532,96	204,4	250,75	288,89	320,07	366,38	398,67	453,94	C6H3O4
c6h12qjDqB	-227,92	532,97	204,39	250,77	288,9	320,07	366,37	398,69	453,91	C6H3O4
c6h12qjEqB	-230,18	532,98	204,4	250,76	288,89	320,07	366,38	398,68	453,94	C6H3O4
c6h12qjFqB	-209,06	543,4	202,83	246,35	284,67	317,17	365,08	396,31	452,82	C6H3O4
c6h12qjAqC	-206,8	537,64	202,83	246,35	284,67	317,17	365,08	396,31	452,82	C6H3O4
c6h12qjBqC	-227,92	532,98	204,4	250,76	288,89	320,07	366,38	398,68	453,94	C6H3O4
c6h12qjCqC	-239,59	508,61	194,15	240,73	281,33	315,46	365,26	398,13	458,55	C6H3O4
c6h12qjDqC	-225,66	538,73	204,39	250,77	288,9	320,07	366,37	398,69	453,91	C6H3O4
c6h12qjEqC	-227,92	538,74	204,4	250,76	288,89	320,07	366,38	398,68	453,94	C6H3O4
c6h12qjFqC	-206,8	537,63	202,83	246,35	284,67	317,17	365,08	396,31	452,82	C6H3O4
c6h11oAqA	-423,88	494,35	167,03	210,22	246,25	276,15	321,79	355,63	441,92	C6H2O3
c6h11oAqB	-347,07	503,54	179,33	221,09	256,22	285,53	330,1	361,88	431,22	C6H2O3
c6h11oAqC	-353,3	504,38	182,74	222,94	256,68	284,86	328,07	359,69	433,49	C6H2O3
c6h11oAqD	-353,3	504,38	182,74	222,94	256,68	284,86	328,07	359,69	433,49	C6H2O3
c6h11oAqE	-355,56	504,38	182,74	222,94	256,68	284,86	328,07	359,69	433,49	C6H2O3
c6h11oAqF	-334,45	509,06	180,26	219,7	253,21	281,5	325,4	357,58	426,68	C6H2O3
c6h11oBqA	-360,49	503,7	181,19	219,8	252,65	280,46	323,88	356,36	430,33	C6H2O3
c6h11oBqC	-376,97	499,84	177,33	217,64	253	283,52	330,57	360,12	366,79	C6H2O3
c6h11oBqD	-383,2	500,69	180	220,24	254,24	282,78	326,79	359	431,09	C6H2O3
c6h11oBqE	-385,46	500,69	180	220,24	254,24	282,78	326,79	359	431,09	C6H2O3
c6h11oBqF	-364,35	505,36	177,49	217,05	250,79	279,4	324,11	356,92	423,99	C6H2O3
c6h11oCqA	-365,55	505,78	179,66	219,37	252,75	280,69	323,83	356,35	439,2	C6H2O3
c6h11oCqB	-378,18	500,27	178,73	220,76	255,77	284,73	328,53	360,66	443,83	C6H2O3
c6h11oCqD	-378,18	500,27	178,73	220,76	255,77	284,73	328,53	360,66	443,83	C6H2O3
c6h11oCqE	-386,67	501,11	182,15	222,59	256,22	284,06	326,51	358,46	445,73	C6H2O3
c6h11oCqF	-365,55	505,78	179,66	219,37	252,75	280,69	323,84	356,36	438,96	C6H2O3
c6h12o#3	-175,71	373,74	147,57	187,55	222,09	251,46	296,53	328	381,09	C6H2O
c6h12o#4	-184,66	373,55	135,97	180,2	216,35	246,65	296,23	337,39	400,51	C6H2O
c6h12o#5	-269,93	347,38	156,06	199,14	234,25	262,9	305,99	337,24	389,28	C6H2O
c6h12o#6	-269,15	346,75	153,58	195,89	230,78	259,56	303,29	335,17	388,16	C6H2O
nc6h13o2h	-272,27	475,12	178,23	219,31	256,42	288,61	337,53	370,76	432,44	C6H14O2
c6h11o2h	-158,51	461,89	167,44	203,53	236,39	265,11	309,17	339,02	393,51	C6H12O2

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

| | | |

c8h16rBqA	-97,54	567,59	220,25	272,37	316,43	353,61	411,66	454,51	528,23	C8H17O2
c8h16rCqA	-97,54	567,59	220,25	272,37	316,43	353,61	411,66	454,51	528,23	C8H17O2
c8h16rDqA	-97,54	567,59	220,25	272,37	316,43	353,61	411,66	454,51	528,23	C8H17O2
c8h16rEqA	-97,54	567,59	220,27	272,34	316,42	353,62	411,67	454,48	528,21	C8H17O2
c8h16rFqA	-97,54	567,59	220,27	272,34	316,42	353,62	411,67	454,48	528,21	C8H17O2
c8h16rGqA	-97,54	567,59	219,84	271,49	315,66	353,17	411,82	454,97	529,05	C8H17O2
c8h16rHqA	-88,34	566,93	220,47	273,06	317,78	355,57	414,2	456,89	530,33	C8H17O2
c8h16rAqB	-112,39	562,25	223,74	275,29	320,59	359,31	418,1	458,69	531,42	C8H17O2
c8h16rBqB	-142,51	559,12	223,02	273,17	317,28	355,13	413,32	454,45	528,07	C8H17O2
c8h16rCqB	-118,66	562,91	223,52	274,6	319,24	357,35	415,56	456,32	529,31	C8H17O2
c8h16rDqB	-118,66	562,91	223,52	274,6	319,24	357,35	415,56	456,32	529,31	C8H17O2
c8h16rEqB	-118,66	562,91	223,53	274,59	319,24	357,36	415,57	456,3	529,31	C8H17O2
c8h16rFqB	-118,66	562,91	223,53	274,59	319,24	357,36	415,57	456,3	529,31	C8H17O2
c8h16rGqB	-118,66	562,92	223,1	273,74	318,48	356,91	415,71	456,78	530,14	C8H17O2
c8h16rHqB	-109,46	562,25	223,74	275,29	320,59	359,31	418,1	458,69	531,42	C8H17O2
c8h16rAqC	-107,2	562,25	223,74	275,29	320,59	359,31	418,1	458,69	531,42	C8H17O2
c8h16rBqC	-116,4	562,92	223,1	273,74	318,48	356,91	415,71	456,78	530,14	C8H17O2
c8h16rCqC	-140,25	559,12	223,45	274,03	318,04	355,57	413,17	453,99	527,26	C8H17O2
c8h16rDqC	-116,4	562,91	223,52	274,6	319,24	357,35	415,56	456,32	529,31	C8H17O2
c8h16rEqC	-116,4	562,91	223,53	274,59	319,24	357,36	415,57	456,3	529,31	C8H17O2
c8h16rFqC	-116,4	562,91	223,53	274,59	319,24	357,36	415,57	456,3	529,31	C8H17O2
c8h16rGqC	-116,4	562,92	223,1	273,74	318,48	356,91	415,71	456,78	530,14	C8H17O2
c8h16rHqC	-107,2	562,25	223,74	275,29	320,59	359,31	418,1	458,69	531,42	C8H17O2
c8h16rAqD	-107,2	562,25	223,74	275,29	320,59	359,31	418,1	458,69	531,42	C8H17O2
c8h16rBqD	-116,4	562,92	223,1	273,74	318,48	356,91	415,71	456,78	530,14	C8H17O2
c8h16rCqD	-116,4	562,91	223,53	274,59	319,24	357,36	415,57	456,3	529,31	C8H17O2
c8h16rDqD	-140,25	559,12	223,45	274,03	318,04	355,57	413,17	453,99	527,26	C8H17O2
c8h16rEqD	-116,4	562,91	223,53	274,59	319,24	357,36	415,57	456,3	529,31	C8H17O2
c8h16rFqD	-116,4	562,91	223,53	274,59	319,24	357,36	415,57	456,3	529,31	C8H17O2
c8h16rGqD	-116,4	562,92	223,1	273,74	318,48	356,91	415,71	456,78	530,14	C8H17O2
c8h16rHqD	-107,2	562,25	223,74	275,29	320,59	359,31	418,1	458,69	531,42	C8H17O2
c8h16qjAqA	-263,57	602,91	239,32	297,62	348,14	390,62	453,22	494,4	569,06	C8H17O4
c8h16qjBqA	-248,2	615,96	248,63	304,5	353,61	395,4	457,82	499,56	574,68	C8H17O4
c8h16qjCqA	-248,2	615,96	248,63	304,5	353,61	395,4	457,82	499,56	574,68	C8H17O4
c8h16qjDqA	-248,2	621,72	248,63	304,5	353,61	395,4	457,82	499,56	574,68	C8H17O4
c8h16qjEqA	-248,2	621,72	248,59	304,54	353,64	395,38	457,8	499,6	574,65	C8H17O4
c8h16qjFqA	-248,2	621,73	248,58	304,56	353,65	395,38	457,79	499,61	574,65	C8H17O4
c8h16qjGqA	-250,46	621,74	248,59	304,55	353,64	395,38	457,8	499,6	574,67	C8H17O4
c8h16qjHqA	-229,34	620,63	245,34	302,29	350,81	391,65	453,91	497,78	573,6	C8H17O4
c8h16qjAqB	-248,2	615,96	248,63	304,5	353,61	395,4	457,82	499,56	574,68	C8H17O4
c8h16qjBqB	-280,98	586,93	239,98	298,85	350,26	393,69	458,01	501,36	580,38	C8H17O4
c8h16qjCqB	-269,31	611,28	250,17	308,95	357,86	398,28	459,05	501,92	575,77	C8H17O4
c8h16qjDqB	-269,31	611,28	250,17	308,95	357,86	398,28	459,05	501,92	575,77	C8H17O4
c8h16qjEqB	-269,31	611,29	250,17	308,95	357,86	398,28	459,05	501,92	575,77	C8H17O4
c8h16qjFqB	-269,31	611,29	250,17	308,94	357,86	398,28	459,05	501,92	575,77	C8H17O4
c8h16qjGqB	-271,57	611,3	250,16	308,96	357,87	398,28	459,04	501,93	575,77	C8H17O4
c8h16qjHqB	-250,46	621,72	248,62	304,51	353,62	395,4	457,82	499,56	574,64	C8H17O4
c8h16qjAqC	-248,2	615,96	248,62	304,51	353,62	395,4	457,82	499,56	574,64	C8H17O4
c8h16qjBqC	-269,31	611,3	250,16	308,96	357,87	398,28	459,04	501,93	575,77	C8H17O4
c8h16qjCqC	-280,98	586,93	239,98	298,85	350,26	393,69	458,01	501,36	580,38	C8H17O4
c8h16qjDqC	-267,05	611,28	250,17	308,95	357,86	398,28	459,05	501,92	575,77	C8H17O4
c8h16qjEqC	-267,05	617,05	250,17	308,95	357,86	398,28	459,05	501,92	575,77	C8H17O4
c8h16qjFqC	-267,05	617,05	250,17	308,94	357,86	398,28	459,05	501,92	575,77	C8H17O4
c8h16qjGqC	-269,31	617,06	250,16	308,96	357,87	398,28	459,04	501,93	575,77	C8H17O4
c8h16qjHqC	-248,2	615,96	248,62	304,51	353,62	395,4	457,82	499,56	574,64	C8H17O4
c8h16qjAqD	-248,2	615,96	248,62	304,51	353,62	395,4	457,82	499,56	574,64	C8H17O4
c8h16qjBqD	-269,31	611,3	250,16	308,96	357,87	398,28	459,04	501,93	575,77	C8H17O4
c8h16qjCqD	-267,05	611,29	250,17	308,94	357,86	398,28	459,05	501,92	575,77	C8H17O4
c8h16qjDqD	-280,98	586,93	239,98	298,85	350,26	393,69	458,01	501,36	580,38	C8H17O4
c8h16qjEqD	-267,05	617,05	250,17	308,95	357,86	398,28	459,05	501,92	575,77	C8H17O4
c8h16qjFqD	-267,05	617,05	250,17	308,94	357,86	398,28	459,05	501,92	575,77	C8H17O4
c8h16qjGqD	-269,31	617,06	250,16	308,96	357,87	398,28	459,04	501,93	575,77	C8H17O4
c8h16qjHqD	-248,2	615,96	248,62	304,51	353,62	395,4	457,82	499,56	574,64	C8H17O4
c8h16o#3	-219,36	463,56	193,32	245,76	291,07	329,66	389,19	431,25	502,85	C8H16O
c8h16o#4	-223,79	451,85	181,73	238,4	285,34	324,86	388,88	440,66	523,15	C8H16O
c8h16o#5	-306,8	425,68	201,85	257,3	303,21	341,12	398,67	440,46	511,09	C8H16O
c8h16o#6	-331,66	414,61	201,85	257,3	303,21	341,12	398,67	440,46	511,09	C8H16O
nc8h17o2h	-313,66	553,42	224,01	277,48	325,38	366,83	430,26	474,02	554,25	C8H18O2
c8h15o2h	-188,35	543,68	213,21	262,98	307,51	345,93	404,17	443,71	516,29	C8H16O2
c8h15oq	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C8H16O3
c7h15hco	-292,16	500,47	194,03	242,91	285,13	321,38	378,95	422,02	496,39	C8H16O
c7h15co	-188,79	454,64	158,66	192,54	219,9	241,87	273,73	295,41	332,1	C8H15O
octanone	-322,06	496,78	191,29	240,21	282,69	319,31	377,66	421,35	496,58	C8H16O
c9h20	-228,9	506,43	211,4	267,09	320,58	367,21	434,16	482,25	552,38	C9H20
Ac9h19	-37,03	527,42	210,66	263,86	314,76	359,35	424,66	472,28	545,62	C9H19
Bc9h19	-34,56	519,84	210,74	265,56	313,11	354,01	418,97	467,87	556,59	C9H19
Cc9h19	-34,56	519,83	211,19	266,38	313,85	354,46	418,84	467,36	555,79	C9H19
Dc9h19	-34,56	519,83	211,19	266,38	313,85	354,46	418,84	467,36	555,79	C9H19
Ec9h19	-34,56	514,07	211,19	266,38	313,85	354,46	418,84	467,36	555,79	C9H19
c9h18	-104,26	500,63	200,82	254,93	302,1	342,87	407,62	454,37	526,74	C9H18
Cc9h17-1	27,55	495,45	197,35	248,95	293,79	332,55	394,38	439,3	509,04	C9H17
c9h16	-203,19	392,81	128,61	156,89	182,07	204,08	239,1	264,3	308	C9H16

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

c9h19qjA	-166,36	578,65	236,23	296,39	348,25	392,44	461,11	510,57	595,04	C9H19O2	c9h18rAqE	-127,89	601,42	246,65	304,36	355,06	398,43	464,47	510,31	592,31	C9H19O2
c9h19qjB	-187,47	573,99	239,51	298,61	351,06	396,19	465,02	512,36	596,09	C9H19O2	c9h18rBqE	-137,1	602,08	246,01	302,8	352,94	396,03	462,09	508,39	591,06	C9H19O2
c9h19qjC	-185,21	573,98	239,49	298,64	351,07	396,18	465	512,38	596,1	C9H19O2	c9h18rCqE	-137,1	602,08	246,42	303,68	353,72	396,46	461,93	507,95	590,23	C9H19O2
c9h19qjD	-185,21	573,98	239,49	298,64	351,07	396,18	465	512,38	596,1	C9H19O2	c9h18rDqE	-137,1	602,08	246,42	303,68	353,72	396,46	461,93	507,95	590,23	C9H19O2
c9h19qjE	-185,21	568,21	239,49	298,64	351,07	396,18	465	512,38	596,1	C9H19O2	c9h18rEqE	-160,94	592,52	246,33	303,13	352,53	394,68	459,53	505,63	588,15	C9H19O2
c9h18rAqA	-133,72	606,73	243,05	301,25	350,71	392,57	457,91	506,02	589,11	C9H19O2	c9h18qiAqA	-284,27	642,07	262,24	326,67	382,59	429,74	499,6	546	630	C9H19O4
c9h18rBqA	-118,24	606,76	243,17	301,41	350,89	392,73	458,04	506,11	589,16	C9H19O2	c9h18qiBqA	-268,89	655,12	271,5	333,61	388,1	434,5	504,17	551,22	635,54	C9H19O4
c9h18rCqA	-118,24	606,76	243,17	301,41	350,89	392,73	458,04	506,11	589,16	C9H19O2	c9h18qiCqA	-268,89	655,12	271,53	333,57	388,08	434,51	504,19	551,18	635,58	C9H19O4
c9h18rDqA	-118,24	606,76	243,17	301,41	350,89	392,73	458,04	506,11	589,16	C9H19O2	c9h18qiDqA	-268,89	655,12	271,53	333,57	388,08	434,51	504,19	551,18	635,58	C9H19O4
c9h18rEqA	-118,24	606,76	243,16	301,43	350,9	392,73	458,03	506,13	589,12	C9H19O2	c9h18qiEqA	-268,89	655,12	271,53	333,58	388,08	434,51	504,18	551,19	635,54	C9H19O4
c9h18rFqA	-118,24	606,76	243,16	301,43	350,9	392,73	458,03	506,13	589,12	C9H19O2	c9h18qiFqA	-268,89	655,12	271,53	333,58	388,08	434,51	504,19	551,19	635,54	C9H19O4
c9h18rGqA	-118,24	606,76	243,16	301,43	350,9	392,73	458,03	506,13	589,12	C9H19O2	c9h18qiGqA	-268,89	655,13	271,51	333,6	388,1	434,5	504,18	551,2	635,54	C9H19O4
c9h18rHqA	-118,24	606,76	242,69	300,62	350,17	392,27	458,16	506,64	589,95	C9H19O2	c9h18qiHqA	-271,15	655,14	271,5	333,61	388,1	434,5	504,17	551,21	635,58	C9H19O4
c9h18rIqA	-109,04	606,1	243,34	302,18	352,28	394,66	460,54	508,57	591,24	C9H19O2	c9h18qiIqA	-250,04	665,55	268,23	331,37	385,29	430,76	500,27	549,41	634,46	C9H19O4
c9h18rAqB	-133,08	601,42	246,6	304,42	355,1	398,41	464,44	510,37	592,31	C9H19O2	c9h18qiAqB	-268,89	655,12	271,5	333,61	388,1	434,5	504,17	551,22	635,54	C9H19O4
c9h18rBqB	-163,2	598,29	245,93	302,24	351,75	394,25	459,69	506,07	588,99	C9H19O2	c9h18qiBqB	-301,67	626,09	262,82	328	384,78	432,79	504,34	553,05	641,32	C9H19O4
c9h18rCqB	-139,36	602,08	246,42	303,68	353,72	396,46	461,93	507,95	590,23	C9H19O2	c9h18qiCqB	-290,01	650,44	273,02	338,07	392,37	437,38	505,36	553,56	636,64	C9H19O4
c9h18rDqB	-139,36	602,08	246,42	303,68	353,72	396,46	461,93	507,95	590,23	C9H19O2	c9h18qiDqB	-290,01	650,44	273,06	338,04	392,34	437,39	505,38	553,53	636,7	C9H19O4
c9h18rEqB	-139,36	602,08	246,42	303,68	353,72	396,46	461,93	507,95	590,23	C9H19O2	c9h18qiEqB	-290,01	656,21	273,06	338,04	392,34	437,39	505,38	553,53	636,7	C9H19O4
c9h18rFqB	-139,36	602,08	246,42	303,68	353,72	396,46	461,93	507,95	590,23	C9H19O2	c9h18qiFqB	-290,01	656,21	273,06	338,04	392,34	437,39	505,38	553,53	636,7	C9H19O4
c9h18rGqB	-139,36	602,08	246,42	303,68	353,72	396,46	461,93	507,95	590,23	C9H19O2	c9h18qiGqB	-290,01	656,21	273,06	338,04	392,34	437,39	505,38	553,53	636,7	C9H19O4
c9h18rHqB	-139,36	602,08	246,01	302,8	352,94	396,03	462,09	508,39	591,06	C9H19O2	c9h18qiHqB	-292,27	656,22	273,05	338,04	392,35	437,39	505,38	553,53	636,64	C9H19O4
c9h18rIqB	-130,15	601,42	246,65	304,36	355,06	398,43	464,47	510,31	592,31	C9H19O2	c9h18qiIqB	-271,15	655,11	271,51	333,6	388,1	434,5	504,17	551,21	635,57	C9H19O4
c9h18rAqC	-127,89	601,42	246,65	304,36	355,06	398,43	464,47	510,31	592,31	C9H19O2	c9h18qiAqC	-268,89	655,12	271,51	333,6	388,1	434,5	504,17	551,21	635,57	C9H19O4
c9h18rBqC	-137,1	602,08	246,01	302,8	352,94	396,03	462,09	508,39	591,06	C9H19O2	c9h18qiBqC	-290,01	650,46	273,05	338,04	392,35	437,39	505,38	553,53	636,64	C9H19O4
c9h18rCqC	-160,94	598,28	246,33	303,13	352,53	394,68	459,53	505,63	588,15	C9H19O2	c9h18qiCqC	-301,67	626,09	262,82	328	384,78	432,79	504,34	553,05	641,32	C9H19O4
c9h18rDqC	-137,1	602,08	246,42	303,68	353,72	396,46	461,93	507,95	590,23	C9H19O2	c9h18qiDqC	-287,75	650,44	273,06	338,04	392,34	437,39	505,38	553,53	636,7	C9H19O4
c9h18rEqC	-137,1	602,08	246,42	303,68	353,72	396,46	461,93	507,95	590,23	C9H19O2	c9h18qiEqC	-287,75	650,44	273,06	338,04	392,34	437,39	505,38	553,53	636,7	C9H19O4
c9h18rFqC	-137,1	602,08	246,42	303,68	353,72	396,46	461,93	507,95	590,23	C9H19O2	c9h18qiFqC	-287,75	650,45	273,06	338,04	392,34	437,39	505,38	553,53	636,7	C9H19O4
c9h18rGqC	-137,1	602,08	246,42	303,68	353,72	396,46	461,93	507,95	590,23	C9H19O2	c9h18qiGqC	-287,75	650,45	273,06	338,04	392,34	437,39	505,38	553,53	636,7	C9H19O4
c9h18rHqC	-137,1	602,08	246,01	302,8	352,94	396,03	462,09	508,39	591,06	C9H19O2	c9h18qiHqC	-290,01	650,46	273,05	338,04	392,35	437,39	505,38	553,53	636,64	C9H19O4
c9h18rIqC	-127,89	601,42	246,65	304,36	355,06	398,43	464,47	510,31	592,31	C9H19O2	c9h18qiIqC	-268,89	660,88	271,51	333,6	388,1	434,5	504,17	551,21	635,57	C9H19O4
c9h18rAqD	-127,89	601,42	246,65	304,36	355,06	398,43	464,47	510,31	592,31	C9H19O2	c9h18qiAqD	-268,89	655,12	271,51	333,6	388,1	434,5	504,17	551,21	635,57	C9H19O4
c9h18rBqD	-137,1	602,08	246,01	302,8	352,94	396,03	462,09	508,39	591,06	C9H19O2	c9h18qiBqD	-290,01	650,46	273,05	338,04	392,35	437,39	505,38	553,53	636,64	C9H19O4
c9h18rCqD	-137,1	602,08	246,42	303,68	353,72	396,46	461,93	507,95	590,23	C9H19O2	c9h18qiCqD	-287,75	650,45	273,06	338,04	392,34	437,39	505,38	553,53	636,7	C9H19O4
c9h18rDqD	-160,94	598,28	246,33	303,13	352,53	394,68	459,53	505,63	588,15	C9H19O2	c9h18qiDqD	-301,67	626,09	262,82	328	384,78	432,79	504,34	553,05	641,32	C9H19O4
c9h18rEqD	-137,1	602,08	246,42	303,68	353,72	396,46	461,93	507,95	590,23	C9H19O2	c9h18qiEqD	-287,75	650,44	273,06	338,04	392,34	437,39	505,38	553,53	636,7	C9H19O4
c9h18rFqD	-137,1	602,08	246,42	303,68	353,72	396,46	461,93	507,95	590,23	C9H19O2	c9h18qiFqD	-287,75	650,45	273,06	338,04	392,34	437,39	505,38	553,53	636,7	C9H19O4
c9h18rGqD	-137,1	602,08	246,42	303,68	353,72	396,46	461,93	507,95	590,23	C9H19O2	c9h18qiGqD	-287,75	650,45	273,06	338,04	392,34	437,39	505,38	553,53	636,7	C9H19O4
c9h18rHqD	-137,1	602,08	246,01	302,8	352,94	396,03	462,09	508,39	591,06	C9H19O2	c9h18qiHqD	-290,01	650,46	273,05	338,04	392,35	437,39	505,38	553,53	636,64	C9H19O4
c9h18rIqD	-127,89	601,42	246,65	304,36	355,06	398,43	464,47	510,31	592,31	C9H19O2	c9h18qiIqD	-268,89	660,88	271,51	333,6	388,1	434,5	504,17	551,21	635,57	C9H19O4

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr

c9h18qjAqE	-268,89	660,88	271,51	333,6	388,1	434,5	504,17	551,21	635,57	C9H19O4
c9h18qjBqE	-290,01	650,46	273,05	338,04	392,35	437,39	505,38	553,53	636,64	C9H19O4
c9h18qjCqE	-287,75	650,45	273,06	338,04	392,34	437,39	505,38	553,53	636,7	C9H19O4
c9h18qjDqE	-287,75	650,45	273,06	338,04	392,34	437,39	505,38	553,53	636,7	C9H19O4
c9h18qjEqE	-301,67	620,32	262,82	328,01	384,78	432,79	504,34	553,05	641,32	C9H19O4
c9h18o#3	-240,06	502,71	216,2	274,86	325,56	368,77	435,52	482,88	563,75	C9H18O
c9h18o#4	-244,49	491	204,59	267,52	319,84	363,96	435,2	492,31	584,3	C9H18O
c9h18o#5	-329,76	476,35	224,71	286,42	337,71	380,22	444,98	492,11	571,99	C9H18O
c9h18o#6	-350,09	453,76	224,71	286,42	337,71	380,22	444,98	492,11	571,99	C9H18O
c9h19o2h	-334,36	592,57	246,92	306,55	359,84	405,95	476,63	525,64	615,13	C9H20O2
c9h17o2h	-220,6	579,34	236,15	290,75	339,81	382,46	448,27	493,89	576,17	C9H18O2
c9h17oq	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C9H18O3
c8h17hco	-312,86	539,62	216,89	272,04	319,63	360,47	425,27	473,68	557,26	C9H18O
c8h17co	-188,79	454,64	158,66	192,54	219,9	241,87	273,73	295,41	332,1	C9H17O
nonanone	-342,75	535,93	214,11	269,39	317,22	358,38	423,95	473,05	557,5	C9H18O
c8h15hco	-10,31	453,33	154,22	190,13	220,98	247,45	289,65	321,14	379,61	C9H16O
c8h15co	-51,7	531,67	199,98	248,34	289,96	325,64	382,32	424,36	502,59	C9H15O
C9H8O4H2	-448,56	638,89	270,3	335,84	393,51	442,58	516	566,24	660,37	C9H20O4
nc10h22	-249,53	545,67	234,15	296,07	355,4	406,93	480,31	532,61	607,88	C10H22
Ac10h21	-57,74	567,11	233,41	292,67	349,4	399,07	471,64	524,33	605,56	C10H21
Bc10h21	-58,1	567,29	231,65	291,42	345,81	393,04	465,35	519,96	600,5	C10H21
Cc10h21	-58,2	567,29	231,65	291,42	345,81	393,04	465,35	519,96	600,69	C10H21
Dc10h21	-58,2	567,29	231,65	291,42	345,81	393,04	465,35	519,96	600,69	C10H21
Ec10h21	-58,2	567,29	231,65	291,42	345,81	393,04	465,35	519,96	600,69	C10H21
c10h20-1	-123,89	544,5	224,48	283,74	336,66	382,45	453,41	506,25	583,46	C10H20
c10h20-2	-136,19	541	223,33	281,9	334,43	380,11	451,42	504,65	582,67	C10H20
c10h20-3	-135,49	542,59	221,79	281,51	334,72	380,71	452,02	505,25	583,26	C10H20
c10h20-4	-136,82	535,38	221,53	281,99	334,62	380,13	452,57	505,01	585,75	C10H20
c10h20-5	-136,82	529,62	221,53	281,99	334,62	380,13	452,57	505,01	585,75	C10H20
Cc10h19-1	6,86	534,63	220,22	278,08	328,29	371,63	440,74	490,93	568,58	C10H19
Dc10h19-2	-8,88	529,2	220,42	276,69	325,89	368,75	438,08	489,29	567,25	C10H19
Ec10h19-3	-9,2	527,83	218,28	275,93	326,08	369,49	438,98	489,65	567,75	C10H19
Fc10h19-4	-9,2	527,73	218,26	275,95	326,09	369,49	438,97	489,67	567,75	C10H19
c10h21qjA	-187,05	617,81	259,12	325,49	382,74	431,55	507,47	562,22	655,91	C10H21O2
c10h21qjB	-208,17	613,15	262,38	327,72	385,55	435,3	511,37	564,01	656,99	C10H21O2
c10h21qjC	-205,91	613,14	262,4	327,7	385,54	435,3	511,38	564	657,01	C10H21O2
c10h21qjD	-205,91	613,14	262,39	327,71	385,55	435,3	511,37	564	657,01	C10H21O2
c10h21qjE	-205,91	613,14	262,39	327,71	385,55	435,3	511,37	564	657,01	C10H21O2
c10h21qA	-333,94	636,39	266,5	333,54	391,48	441,16	519,26	575,1	665,37	C10H22O2
c10h21qB	-355,05	631,72	269,64	336,08	394,27	444,61	523,44	576,23	618,77	C10H22O2
c10h21qC	-352,8	631,72	269,64	336,08	394,27	444,61	523,44	576,23	618,77	C10H22O2
c10h21qD	-352,8	631,72	269,64	336,08	394,27	444,61	523,44	576,23	618,77	C10H22O2
c10h21qE	-352,8	631,72	269,64	336,08	394,27	444,61	523,44	576,23	618,77	C10H22O2
c10h21ojA	-185,56	583,46	240,11	305,23	361,47	409,72	485,8	540,62	628,78	C10H21O
c10h21ojB	-197,89	578,81	243,25	307,78	364,26	413,16	489,98	541,78	582,04	C10H21O
c10h21ojC	-195,63	578,8	243,26	307,77	364,25	413,16	489,99	541,77	582,04	C10H21O
c10h21ojD	-195,63	578,79	243,26	307,77	364,26	413,16	489,99	541,77	582,04	C10H21O
c10h21ojE	-195,63	578,79	243,26	307,77	364,26	413,16	489,99	541,77	582,04	C10H21O
c10h20rAqA	-154,42	645,89	265,97	330,32	385,17	431,68	504,28	557,64	649,98	C10H21O2
c10h20rBqA	-138,94	645,92	266,06	330,5	385,37	431,84	504,4	557,75	650,04	C10H21O2
c10h20rCqA	-138,94	645,92	266,06	330,5	385,37	431,84	504,4	557,75	650,04	C10H21O2
c10h20rDqA	-138,94	645,92	266,06	330,5	385,37	431,84	504,4	557,75	650,04	C10H21O2
c10h20rEqA	-138,94	645,92	266,06	330,5	385,37	431,84	504,4	557,75	650,04	C10H21O2
c10h20rFqA	-138,94	645,92	266,04	330,52	385,38	431,84	504,39	557,76	650,07	C10H21O2
c10h20rGqA	-138,94	645,92	266,04	330,52	385,38	431,84	504,39	557,76	650,07	C10H21O2
c10h20rHqA	-138,94	645,92	266,04	330,52	385,38	431,84	504,39	557,76	650,07	C10H21O2
c10h20rIqA	-138,94	645,92	265,6	329,69	384,63	431,39	504,53	558,26	650,87	C10H21O2
c10h20rJqA	-129,73	645,26	266,26	331,23	386,74	433,79	506,92	560,16	652,14	C10H21O2
c10h20rAqB	-153,78	640,58	269,5	333,49	389,57	437,52	510,81	561,98	653,2	C10H21O2
c10h20rBqB	-183,9	637,45	268,81	331,34	386,24	433,36	506,05	557,72	649,94	C10H21O2
c10h20rCqB	-160,05	641,24	269,34	332,72	388,17	435,59	508,31	559,53	651,14	C10H21O2
c10h20rDqB	-160,05	641,24	269,34	332,72	388,17	435,59	508,31	559,53	651,14	C10H21O2
c10h20rEqB	-160,05	641,24	269,34	332,72	388,17	435,59	508,31	559,53	651,14	C10H21O2
c10h20rFqB	-160,05	641,24	269,33	332,74	388,18	435,58	508,3	559,55	651,16	C10H21O2
c10h20rGqB	-160,05	641,24	269,33	332,74	388,18	435,58	508,3	559,55	651,16	C10H21O2
c10h20rHqB	-160,05	641,24	269,33	332,74	388,18	435,58	508,3	559,55	651,16	C10H21O2
c10h20rIqB	-160,05	641,24	268,9	331,88	387,42	435,14	508,45	560,02	651,96	C10H21O2
c10h20rJqB	-150,85	640,58	269,5	333,49	389,57	437,52	510,81	561,98	653,2	C10H21O2
c10h20rAqC	-148,59	640,58	269,5	333,49	389,57	437,52	510,81	561,98	653,2	C10H21O2
c10h20rBqC	-157,79	641,24	268,9	331,88	387,42	435,14	508,45	560,02	651,96	C10H21O2
c10h20rCqC	-181,64	637,45	269,26	332,15	386,98	433,81	505,92	557,21	649,11	C10H21O2
c10h20rDqC	-157,79	641,24	269,34	332,72	388,17	435,59	508,31	559,53	651,14	C10H21O2
c10h20rEqC	-157,79	641,24	269,34	332,72	388,17	435,59	508,31	559,53	651,14	C10H21O2
c10h20rFqC	-157,79	641,24	269,33	332,74	388,18	435,58	508,3	559,55	651,16	C10H21O2
c10h20rGqC	-157,79	641,24	269,33	332,74	388,18	435,58	508,3	559,55	651,16	C10H21O2
c10h20rHqC	-157,79	641,24	269,33	332,74	388,18	435,58	508,3	559,55	651,16	C10H21O2
c10h20rIqC	-157,79	641,24	268,9	331,88	387,42	435,14	508,45	560,02	651,96	C10H21O2
c10h20rJqC	-148,59	640,58	269,5	333,49	389,57	437,52	510,81	561,98	653,2	C10H21O2
c10h20rAqD	-148,59	640,58	269,5	333,49	389,57	437,52	510,81	561,98	653,2	C10H21O2
c10h20rBqD	-157,79	641,24	268,9	331,88	387,42	435,14	508,45	560,02	651,96	C10H21O2
c10h20rCqD	-157,79	641,24	269,33	332,74	388,18	435,58	508,3	559,55	651,16	C10H21O2
c10h20rDqD	-181,64	637,45	269,26	332,15	386,98	433,81	505,92	557,21	649,11	C10H21O2

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

c10h20rEqD	-157,79	641,24	269,34	332,72	388,17	435,59	508,31	559,53	651,14	C10H21O2
c10h20rFqD	-157,79	641,24	269,33	332,74	388,18	435,58	508,3	559,55	651,16	C10H21O2
c10h20rGqD	-157,79	641,24	269,33	332,74	388,18	435,58	508,3	559,55	651,16	C10H21O2
c10h20rHqD	-157,79	641,24	269,33	332,74	388,18	435,58	508,3	559,55	651,16	C10H21O2
c10h20rIqD	-157,79	641,24	268,9	331,88	387,42	435,14	508,45	560,02	651,96	C10H21O2
c10h20rJqD	-148,59	640,58	269,5	333,49	389,57	437,52	510,81	561,98	653,2	C10H21O2
c10h20rAqE	-148,59	640,58	269,5	333,49	389,57	437,52	510,81	561,98	653,2	C10H21O2
c10h20rBqE	-157,79	641,24	268,9	331,88	387,42	435,14	508,45	560,02	651,96	C10H21O2
c10h20rCqE	-157,79	641,24	269,33	332,74	388,18	435,58	508,3	559,55	651,16	C10H21O2
c10h20rDqE	-157,79	641,24	269,33	332,74	388,18	435,58	508,3	559,55	651,16	C10H21O2
c10h20rEqE	-181,64	637,45	269,26	332,15	386,98	433,81	505,92	557,21	649,11	C10H21O2
c10h20rFqE	-157,79	641,24	269,33	332,74	388,18	435,58	508,3	559,55	651,16	C10H21O2
c10h20rGqE	-157,79	641,24	269,33	332,74	388,18	435,58	508,3	559,55	651,16	C10H21O2
c10h20rHqE	-157,79	641,24	269,33	332,74	388,18	435,58	508,3	559,55	651,16	C10H21O2
c10h20rIqE	-157,79	641,24	268,9	331,88	387,42	435,14	508,45	560,02	651,96	C10H21O2
c10h20rJqE	-148,59	640,58	269,5	333,49	389,57	437,52	510,81	561,98	653,2	C10H21O2
c10h20qjAqA	-304,96	681,23	285,14	355,75	417,07	468,86	545,97	597,63	690,9	C10H21O4
c10h20qjBqA	-289,59	694,28	294,39	362,69	422,58	473,61	550,53	602,85	696,44	C10H21O4
c10h20qjCqA	-289,59	694,28	294,39	362,69	422,58	473,61	550,53	602,85	696,44	C10H21O4
c10h20qjDqA	-289,59	694,28	294,39	362,69	422,58	473,61	550,53	602,85	696,44	C10H21O4
c10h20qjEqA	-289,59	700,04	294,39	362,69	422,58	473,61	550,53	602,85	696,44	C10H21O4
c10h20qjFqA	-289,59	700,04	294,39	362,69	422,58	473,61	550,53	602,85	696,44	C10H21O4
c10h20qjGqA	-289,59	700,04	294,39	362,69	422,58	473,61	550,53	602,85	696,44	C10H21O4
c10h20qjHqA	-289,59	700,05	294,4	362,69	422,58	473,61	550,54	602,84	696,44	C10H21O4
c10h20qjIqA	-291,85	700,06	294,39	362,7	422,59	473,61	550,53	602,85	696,44	C10H21O4
c10h20qjJqA	-270,73	698,95	291,13	360,45	419,77	469,88	546,64	601,03	695,4	C10H21O4
c10h20qjAqB	-289,59	694,28	294,38	362,71	422,59	473,6	550,52	602,87	696,48	C10H21O4
c10h20qjBqB	-322,37	665,25	285,73	357,07	419,24	471,9	550,71	604,66	702,26	C10H21O4
c10h20qjCqB	-310,7	689,6	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjDqB	-310,7	689,6	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjEqB	-310,7	689,6	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjFqB	-310,7	689,6	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjGqB	-310,7	689,6	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjHqB	-310,7	689,61	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjIqB	-312,96	689,62	295,89	367,19	426,87	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjJqB	-291,85	700,03	294,41	362,67	422,57	473,62	550,54	602,83	696,44	C10H21O4
c10h20qjAqC	-289,59	694,28	294,39	362,69	422,58	473,61	550,53	602,85	696,44	C10H21O4
c10h20qjBqC	-310,7	689,62	295,89	367,19	426,87	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjCqC	-322,37	665,25	285,75	357,05	419,23	471,91	550,72	604,65	702,21	C10H21O4
c10h20qjDqC	-308,45	689,6	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjEqC	-308,45	689,6	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjFqC	-308,45	695,36	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjGqC	-308,45	695,37	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjHqC	-308,45	695,37	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjIqC	-310,7	695,38	295,89	367,19	426,87	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjJqC	-289,59	694,27	294,41	362,67	422,57	473,62	550,54	602,83	696,44	C10H21O4
c10h20qjAqD	-289,59	694,28	294,39	362,69	422,58	473,61	550,53	602,85	696,44	C10H21O4
c10h20qjBqD	-310,7	689,62	295,89	367,19	426,87	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjCqD	-308,45	689,61	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjDqD	-322,37	665,25	285,74	357,05	419,24	471,9	550,72	604,65	702,21	C10H21O4
c10h20qjEqD	-308,45	689,6	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjFqD	-308,45	695,36	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjGqD	-308,45	695,37	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjHqD	-308,45	695,37	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjIqD	-310,7	695,38	295,89	367,19	426,87	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjJqD	-289,59	694,27	294,41	362,67	422,57	473,62	550,54	602,83	696,44	C10H21O4
c10h20qjAqE	-289,59	694,27	294,41	362,67	422,57	473,62	550,54	602,83	696,44	C10H21O4
c10h20qjBqE	-310,7	689,62	295,89	367,19	426,87	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjCqE	-308,45	689,61	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjDqE	-308,45	689,6	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjEqE	-322,37	665,25	285,74	357,05	419,24	471,9	550,72	604,65	702,21	C10H21O4
c10h20qjFqE	-308,45	695,36	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjGqE	-308,45	695,37	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjHqE	-308,45	695,37	295,9	367,18	426,86	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjIqE	-310,7	695,38	295,89	367,19	426,87	476,48	551,69	605,2	697,55	C10H21O4
c10h20qjJqE	-289,59	694,27	294,41	362,67	422,57	473,62	550,54	602,83	696,44	C10H21O4
c10h19oAqA	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oAqB	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oAqC	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oAqD	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oAqE	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oBqA	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oBqC	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oBqD	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oBqE	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oBqF	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oCqA	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oCqB	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oCqD	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oCqE	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oCqF	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oCqG	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

c10h19oDqA	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oDqB	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oDqC	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oDqE	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oDqF	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oDqG	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oDqH	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oEqA	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oEqB	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oEqC	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oEqD	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oEqF	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oEqG	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oEqH	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h19oEqI	-250,26	543,75	234,55	298,39	354,48	403,03	479,91	536,68	638,45	C10H20O3
c10h20o-AB	-239,64	552,3	237,24	300,13	355,84	404,45	480,93	531,09	552,01	C10H20O
c10h20o-BC	-260,75	541,86	239,04	304,07	360,03	407,75	481,97	534,22	618,43	C10H20O
c10h20o-CD	-258,49	541,86	239,04	304,07	360,03	407,75	481,97	534,22	618,43	C10H20O
c10h20o-DE	-258,49	541,86	239,04	304,07	360,03	407,75	481,97	534,22	618,43	C10H20O
c10h20o-EF	-258,49	530,34	239,04	304,07	360,03	407,75	481,97	534,22	618,43	C10H20O
c10h20o-AC	-246,33	540,58	227,2	290,94	348,7	400,19	483,44	539,37	552,22	C10H20O
c10h20o-BD	-267,45	530,15	227,58	296,35	354,36	403,34	481,26	544,63	715,52	C10H20O
c10h20o-CE	-265,19	530,15	227,58	296,35	354,36	403,34	481,26	544,63	715,52	C10H20O
c10h20o-DF	-265,19	530,15	227,58	296,35	354,36	403,34	481,26	544,63	715,52	C10H20O
c10h20o-AD	-327,08	525,94	246,51	310,81	367,3	416,16	491,82	539,78	552,12	C10H20O
c10h20o-BE	-348,2	515,5	247,58	315,49	372,24	419,39	491,21	543,92	672,76	C10H20O
c10h20o-CF	-345,94	515,5	247,58	315,49	372,24	419,39	491,21	543,92	672,76	C10H20O
c10h20o-DG	-345,94	503,98	247,58	315,49	372,24	419,39	491,21	543,92	672,76	C10H20O
c10h20o-AE	-349,67	503,35	246,54	310,77	367,28	416,17	491,84	539,74	552,08	C10H20O
c10h20o-BF	-370,79	492,91	247,58	315,49	372,24	419,39	491,21	543,92	672,76	C10H20O
c10h20o-CG	-368,53	492,91	247,58	315,49	372,24	419,39	491,21	543,92	672,76	C10H20O
Ac10h19oB	-170,14	571,45	235,91	296,44	348,19	392,29	461,95	513,69	612,52	C10H19O
Bc10h19oA	-156,56	570,52	239,41	299,07	349,75	392,81	460,94	512,1	612,96	C10H19O
Bc10h19oC	-196,45	567,1	238,38	298	348,61	391,56	459,48	511,42	627,02	C10H19O
Cc10h19oB	-195,24	564,75	236,73	296,52	347,4	390,74	459,65	511,48	610,5	C10H19O
Cc10h19oD	-196,45	565,52	238,91	298,82	349,35	392,03	459,39	510,89	625,9	C10H19O
Dc10h19oC	-196,45	565,16	238,89	298,87	349,39	392,03	459,36	510,93	626,27	C10H19O
Dc10h19oE	-196,45	565,34	238,91	298,86	349,38	392,03	459,38	510,93	625,9	C10H19O
Ec10h19oD	-196,45	565,24	238,94	298,83	349,36	392,04	459,39	510,9	625,92	C10H19O
Fc10h19oE	-196,45	565,34	238,95	298,82	349,35	392,04	459,4	510,89	625,92	C10H19O
Ac10h19oC	-160,46	584,35	238,86	298,66	348,92	391,23	457,84	508,76	623,33	C10H19O

Cc10h19oA	-138,55	588,28	239,28	298,26	347,99	390,09	456,9	507,57	607,72	C10H19O
Bc10h19oD	-169,66	585,01	238,27	297,05	346,76	388,85	455,49	506,8	621,73	C10H19O
Dc10h19oB	-168,45	584,59	236,52	295,59	345,56	388	455,61	506,9	605,44	C10H19O
Cc10h19oE	-169,66	585,01	238,65	297,96	347,56	389,27	455,31	506,38	620,9	C10H19O
Ec10h19oC	-169,66	585,01	238,66	297,94	347,55	389,28	455,31	506,36	621,21	C10H19O
Dc10h19oF	-169,66	585,01	238,65	297,96	347,56	389,27	455,31	506,38	620,9	C10H19O
Fc10h19oD	-169,66	585,01	238,65	297,96	347,56	389,27	455,31	506,38	620,9	C10H19O
Ac10h19oD	-160,46	584,35	238,86	298,67	348,92	391,23	457,84	508,77	622,97	C10H19O
Dc10h19oA	-138,55	588,28	239,28	298,26	347,99	390,09	456,9	507,57	607,72	C10H19O
Bc10h19oE	-169,66	585,01	238,27	297,05	346,76	388,85	455,49	506,8	621,73	C10H19O
Ec10h19oB	-168,45	584,59	236,52	295,59	345,56	388	455,61	506,9	605,44	C10H19O
Cc10h19oF	-169,66	585,01	238,65	297,96	347,56	389,27	455,31	506,38	620,9	C10H19O
Fc10h19oC	-169,66	585,01	238,66	297,94	347,55	389,28	455,31	506,36	621,21	C10H19O
Gc10h19oD	-169,66	585,01	238,65	297,96	347,56	389,27	455,31	506,38	620,9	C10H19O
Ac10h19oE	-160,46	584,35	238,86	298,67	348,92	391,23	457,84	508,77	622,97	C10H19O
Ec10h19oA	-138,55	588,28	239,28	298,26	347,99	390,09	456,9	507,57	607,72	C10H19O
Fc10h19oB	-168,45	584,59	236,52	295,59	345,56	388	455,61	506,9	605,44	C10H19O
Bc10h19oF	-169,66	585,01	238,27	297,05	346,76	388,85	455,49	506,8	621,73	C10H19O
Gc10h19oC	-169,66	585,01	238,66	297,94	347,55	389,28	455,31	506,36	621,21	C10H19O
Hc10h19oD	-169,66	585,01	238,65	297,96	347,56	389,27	455,31	506,38	620,9	C10H19O
c10h19oBqjA	-296,39	641,74	265,21	328,38	381,89	427,07	497,55	549,67	660,33	C10H19O3
c10h19oAqjB	-215,19	641,58	264,43	328,57	384,35	432,26	506,2	553,66	575,2	C10H19O3
c10h19oCqjB	-314,08	638,32	262,8	329,28	384,97	431,35	502,22	553,92	674,28	C10H19O3
c10h19oBqjC	-312,87	637,88	261,51	326,05	382,1	430,17	504,48	553,22	589,08	C10H19O3
c10h19oDqjC	-314,08	638,3	262,79	329,29	384,98	431,35	502,22	553,93	674,06	C10H19O3
c10h19oCqjD	-314,08	638,3	262,8	329,28	384,97	431,36	502,23	553,91	674,08	C10H19O3
c10h19oEqjD	-314,08	638,3	262,79	329,29	384,98	431,35	502,22	553,93	674,06	C10H19O3
c10h19oDqjE	-314,08	638,3	262,76	329,32	385	431,34	502,2	553,95	674,19	C10H19O3
c10h19oEqjF	-314,08	638,3	262,76	329,32	385	431,34	502,2	553,95	674,19	C10H19O3
c10h19oCqjA	-301,46	643,82	263,71	327,91	381,97	427,31	497,52	549,64	669,29	C10H19O3
c10h19oAqjC	-289,2	642,41	266,81	331,46	385,88	431,49	501,76	552,96	663,49	C10H19O3
c10h19oDqjB	-322,57	639,16	266,22	331,12	385,42	430,69	500,2	551,73	676,29	C10H19O3
c10h19oBqjD	-319,1	638,72	264,06	328,78	383,44	429,41	500,48	552,27	660,92	C10H19O3
c10h19oEqjC	-320,31	639,15	266,25	331,07	385,4	430,7	500,22	551,69	676,24	C10H19O3
c10h19oCqjE	-320,31	639,14	266,22	331,11	385,42	430,69	500,2	551,72	676,29	C10H19O3
c10h19oFqjD	-320,31	639,14	266,26	331,06	385,39	430,71	500,23	551,67	676,24	C10H19O3
c10h19oDqjF	-320,31	639,14	266,22	331,11	385,42	430,69	500,2	551,72	676,29	C10H19O3
c10h19oDqjA	-301,46	643,82	263,71	327,92	381,97	427,31	497,51	549,64	669,29	C10H19O3
c10h19oAqjD	-289,2	642,41	266,8	331,48	385,9	431,49	501,75	552,97	663,49	C10H19O3
c10h19oEqjB	-322,57	639,16	266,24	331,09	385,41	430,69	500,21	551,7	676,24	C10H19O3
c10h19oBqjE	-319,1	638,72	264,09	328,74	383,42	429,42	500,5	552,24	661,06	C10H19O3

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Cc10h18oDqF	-298,99	647,95	273,36	337,09	389,91	433,71	501,16	551,86	675,53	C10H19O3
Ec10h18oDq	-298,99	648,09	273,41	337,08	389,9	433,73	501,18	551,84	675,51	C10H19O3
Ec10h18oDqH	-298,99	647,96	273,41	337,07	389,89	433,73	501,19	551,83	675,51	C10H19O3
Dc10h18oEqA	-280,13	652,71	270,91	333,88	386,45	430,35	498,5	549,76	668,52	C10H19O3
Dc10h18oEqB	-301,25	648,55	273,41	337,09	389,91	433,72	501,18	551,85	675,46	C10H19O3
Fc10h18oEqB	-301,25	647,88	273,38	337,11	389,92	433,71	501,16	551,87	675,49	C10H19O3
Fc10h18oEqC	-298,99	647,88	273,38	337,11	389,92	433,71	501,16	551,87	675,49	C10H19O3
Ac10h18oEqD	-256,76	665,74	269,9	335,07	388,99	433,58	501,66	551,9	670,26	C10H19O3
Bc10h18oEqD	-265,97	666,4	269,7	334,36	387,63	431,62	499,13	549,51	668,29	C10H19O3
Fc10h18oEqD	-292,76	647,04	269,96	335,28	389,47	434,38	503,19	554,06	673,23	C10H19O3
Gc10h18oEqD	-265,97	666,4	269,7	334,36	387,63	431,62	499,13	549,51	668,29	C10H19O3
Cc10h18oEqF	-265,97	666,4	269,72	334,33	387,62	431,64	499,14	549,48	668,43	C10H19O3
Dc10h18oEqF	-292,76	647	269,95	335,28	389,47	434,38	503,18	554,07	673,41	C10H19O3
Hc10h18oEqF	-265,97	666,4	269,72	334,33	387,62	431,64	499,14	549,48	668,43	C10H19O3
Ic10h18oEqF	-265,97	666,41	269,31	333,45	386,84	431,2	499,3	549,93	669,21	C10H19O3
Ec10h18oFqB	-301,25	648,28	273,43	337,06	389,89	433,73	501,19	551,82	675,52	C10H19O3
Ec10h18oFqC	-298,99	648,37	273,39	337,11	389,92	433,72	501,17	551,86	675,46	C10H19O3
Gc10h18oFqD	-298,99	647,84	273,43	337,03	389,87	433,73	501,2	551,8	675,5	C10H19O3
Dc10h18oFqE	-292,76	647	269,95	335,28	389,47	434,38	503,18	554,07	673,41	C10H19O3
c10h18oAqBqjD	-385,51	723,79	297,83	367,89	425,98	473,83	545,56	596,11	710,83	C10H19O5
c10h18oAqBqjE	-385,51	723,79	297,83	367,89	425,98	473,83	545,56	596,11	710,83	C10H19O5
c10h18oAqCqjE	-391,74	724,63	301,32	369,64	426,38	473,19	543,58	593,84	713,14	C10H19O5
c10h18oAqCqjF	-391,74	718,87	301,32	369,64	426,38	473,19	543,58	593,84	713,14	C10H19O5
c10h18oAqDqjB	-317,73	718,04	297,83	367,9	425,99	473,83	545,56	596,12	710,83	C10H19O5
c10h18oAqEqjB	-317,73	718,04	297,83	367,9	425,99	473,83	545,56	596,12	710,83	C10H19O5
c10h18oBqAqjC	-392,7	723,11	296,3	364,73	421,94	469,43	541,39	592,76	707,45	C10H19O5
c10h18oBqCqjA	-392,7	717,36	296,29	364,74	421,94	469,43	541,38	592,77	707,45	C10H19O5
c10h18oBqDqjA	-398,93	718,2	299,71	366,59	422,4	468,76	539,35	590,59	709,96	C10H19O5
c10h18oBqEqjA	-398,93	718,2	299,77	366,5	422,35	468,78	539,39	590,52	709,72	C10H19O5
c10h18oBqEqjC	-415,41	714,34	295,1	365,18	423,52	471,76	544,29	595,4	708,59	C10H19O5
c10h18oBqFqjC	-415,41	720,1	295,1	365,18	423,52	471,76	544,29	595,4	708,59	C10H19O5
c10h18oCqAqjD	-397,76	725,2	294,78	364,29	422,03	469,66	541,35	592,75	716,44	C10H19O5
c10h18oCqBqjD	-410,39	719,68	294,98	364,51	423,86	473,82	548,66	595,45	629,89	C10H19O5
c10h18oCqBqjE	-416,62	720,52	297,25	367,53	425,51	473,03	544	594,87	723,86	C10H19O5
c10h18oCqDqjA	-397,76	719,44	294,76	364,31	422,04	469,66	541,34	592,77	716,44	C10H19O5
c10h18oCqDqjB	-410,39	713,94	294,94	364,56	423,9	473,8	548,64	595,5	629,89	C10H19O5
c10h18oCqDqjF	-416,62	714,76	297,25	367,53	425,51	473,03	544,01	594,86	723,56	C10H19O5
c10h18oCqDqjG	-416,62	714,76	297,26	367,52	425,5	473,03	544,01	594,86	723,56	C10H19O5
c10h18oCqEqjB	-416,62	714,78	297,23	367,55	425,53	473,03	543,99	594,88	723,86	C10H19O5
c10h18oCqFqjD	-416,62	720,52	297,25	367,53	425,51	473,03	544,01	594,86	723,56	C10H19O5
c10h18oCqGqjD	-416,62	720,52	297,25	367,53	425,51	473,03	544,01	594,86	723,56	C10H19O5
c10h19oFqjC	-320,31	639,15	266,25	331,07	385,4	430,7	500,22	551,69	676,24	C10H19O3
c10h19oCqjF	-320,31	639,14	266,22	331,11	385,42	430,69	500,2	551,72	676,29	C10H19O3
c10h19oDqj	-320,31	639,14	266,22	331,11	385,42	430,69	500,2	551,72	676,29	C10H19O3
c10h19oEqjA	-301,46	643,81	263,72	327,9	381,96	427,32	497,52	549,62	669,29	C10H19O3
c10h19oAqjE	-289,2	642,41	266,8	331,48	385,9	431,49	501,75	552,97	663,49	C10H19O3
c10h19oBqjF	-319,1	638,72	264,08	328,76	383,43	429,41	500,49	552,25	661,06	C10H19O3
c10h19oFqjB	-322,57	639,16	266,22	331,12	385,42	430,69	500,2	551,73	676,29	C10H19O3
c10h19oCqj	-320,31	639,14	266,22	331,11	385,42	430,69	500,2	551,72	676,29	C10H19O3
c10h19oDqjH	-320,31	639,15	266,23	331,11	385,42	430,69	500,21	551,71	676,29	C10H19O3
Dc10h18oAqB	45,6	669,67	271,34	333,63	387,01	432,54	503,11	549,23	569,22	C10H19O3
Ec10h18oAqB	-234,86	669,67	271,34	333,63	387,01	432,54	503,11	549,23	569,22	C10H19O3
Ec10h18oAqC	-241,09	670,52	273,77	336,46	388,51	431,79	498,7	548,48	657,65	C10H19O3
Fc10h18oAqC	-241,09	670,52	273,77	336,46	388,51	431,79	498,7	548,48	657,65	C10H19O3
Bc10h18oAqD	-267,88	652,94	273,85	337,35	390,31	434,48	502,71	553,07	662,69	C10H19O3
Bc10h18oAqE	-267,88	652,91	273,87	337,33	390,3	434,49	502,72	553,05	662,69	C10H19O3
Cc10h18oBqA	-275,07	650,29	272,43	334,31	386,35	430,12	498,55	549,76	659,48	C10H19O3
Ac10h18oBqC	-266,44	652,84	267,76	332,02	387,42	434,71	507,7	555,64	590,33	C10H19O3
Ac10h18oBqD	-272,67	653,68	270,38	334,66	388,71	433,98	503,75	554,61	662,12	C10H19O3
Ac10h18oBqE	-272,67	653,68	270,34	334,71	388,74	433,97	503,72	554,66	662,2	C10H19O3
Cc10h18oBqE	-297,78	647,46	271,26	334,68	387,88	432,45	501,48	552,35	660,24	C10H19O3
Cc10h18oBqF	-297,78	647,36	271,23	334,72	387,91	432,44	501,46	552,38	660,24	C10H19O3
Dc10h18oCqA	-280,13	652,56	270,93	333,85	386,43	430,36	498,51	549,73	668,52	C10H19O3
Dc10h18oCqB	-292,76	647,04	269,97	335,28	389,47	434,38	503,19	554,06	673,49	C10H19O3
Ec10h18oCqB	-265,97	666,4	269,69	334,37	387,64	431,62	499,12	549,51	668,51	C10H19O3
Ac10h18oCqD	-256,76	665,74	269,91	335,05	388,99	433,58	501,66	551,89	670,44	C10H19O3
Bc10h18oCqD	-292,76	648,62	269,48	334,34	388,65	433,92	503,34	554,5	674,11	C10H19O3
Fc10h18oCqD	-265,97	666,4	269,67	334,39	387,65	431,62	499,11	549,53	668,35	C10H19O3
Gc10h18oCqD	-265,97	666,4	269,67	334,39	387,65	431,62	499,11	549,53	668,35	C10H19O3
Bc10h18oCqE	-298,99	649,46	272,92	336,15	389,09	433,26	501,32	552,29	676,32	C10H19O3
Dc10h18oCqF	-298,99	647,86	273,41	337,06	389,89	433,72	501,18	551,83	675,5	C10H19O3
Dc10h18oCq	-298,99	647,74	273,44	337,03	389,87	433,74	501,2	551,8	675,5	C10H19O3
Cc10h18oDqA	-280,13	652,74	270,91	333,87	386,44	430,35	498,5	549,75	668,46	C10H19O3
Ec10h18oDqA	-280,13	652,53	270,92	333,85	386,43	430,36	498,51	549,73	668,52	C10H19O3
Ec10h18oDqB	-301,25	647,85	273,4	337,1	389,91	433,72	501,17	551,85	675,53	C10H19O3
Ac10h18oDqC	41,64	665,74	269,9	335,07	388,99	433,58	501,66	551,9	670,26	C10H19O3
Ec10h18oDqC	-292,76	647,01	269,96	335,28	389,47	434,38	503,19	554,06	673,22	C10H19O3
Fc10h18oDqC	-265,97	666,4	269,7	334,36	387,63	431,62	499,13	549,51	668,29	C10H19O3
Bc10h18oDqE	-265,97	666,41	269,31	333,45	386,84	431,2	499,3	549,93	669,21	C10H19O3
Cc10h18oDqE	-292,76	647,11	269,91	335,29	389,47	434,37	503,17	554,08	673,39	C10H19O3
Gc10h18oDqE	41,53	666,4	269,72	334,33	387,62	431,64	499,14	549,48	668,43	C10H19O3
Hc10h18oDqE	-265,97	666,4	269,72	334,33	387,62	431,64	499,14	549,48	668,43	C10H19O3

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

c10h18oDqAqjC	-397,76	725,2	294,76	364,31	422,04	469,66	541,34	592,77	716,44	C10H19O5
c10h18oDqAqjE	-397,76	719,43	294,78	364,29	422,03	469,66	541,35	592,75	716,44	C10H19O5
c10h18oDqBqjE	-418,88	720,52	297,26	367,53	425,51	473,04	544,01	594,86	723,59	C10H19O5
c10h18oDqCqjA	-397,76	719,44	294,76	364,31	422,04	469,66	541,34	592,77	716,44	C10H19O5
c10h18oDqCqjE	-410,39	719,68	294,97	364,53	423,88	473,81	548,65	595,47	629,89	C10H19O5
c10h18oDqCqjF	-416,62	714,76	297,25	367,53	425,51	473,03	544,01	594,86	723,56	C10H19O5
c10h18oDqEqjB	-418,88	714,78	297,27	367,51	425,5	473,04	544,02	594,84	723,59	C10H19O5
c10h18oDqEqjC	-410,39	713,92	294,97	364,52	423,87	473,81	548,66	595,47	629,89	C10H19O5
c10h18oDqEqjG	-416,62	714,76	297,23	367,56	425,52	473,02	544	594,89	723,62	C10H19O5
c10h18oDqEqjH	-416,62	714,77	297,22	367,57	425,53	473,02	543,99	594,9	723,62	C10H19O5
c10h18oDqFqjC	-416,62	720,53	297,24	367,54	425,52	473,03	544	594,88	723,56	C10H19O5
c10h18oDqGqjE	-416,62	720,52	297,23	367,56	425,52	473,02	544	594,89	723,62	C10H19O5
c10h18oDqHqjE	-416,62	720,52	297,23	367,56	425,52	473,02	544	594,89	723,62	C10H19O5
c10h18oEqAqjD	-397,76	725,2	294,78	364,29	422,03	469,66	541,35	592,75	716,44	C10H19O5
c10h18oEqBqjD	-418,88	720,52	297,23	367,56	425,52	473,02	544	594,89	723,62	C10H19O5
c10h18oEqBqjF	-418,88	720,52	297,23	367,56	425,52	473,02	544	594,89	723,62	C10H19O5
c10h18oEqCqjF	-416,62	714,76	297,25	367,53	425,51	473,03	544,01	594,86	723,56	C10H19O5
c10h18oEqDqjA	-397,76	719,43	294,78	364,29	422,03	469,66	541,35	592,75	716,44	C10H19O5
c10h18oEqDqjB	-418,88	714,78	297,23	367,57	425,53	473,02	543,99	594,9	723,62	C10H19O5
c10h18oEqDqjF	-410,39	713,92	294,97	364,53	423,88	473,81	548,65	595,47	629,89	C10H19O5
c10h18oEqDqjG	-416,62	714,76	297,26	367,52	425,5	473,03	544,01	594,86	723,56	C10H19O5
c10h18oEqFqjC	-416,62	720,53	297,24	367,54	425,52	473,03	544	594,88	723,56	C10H19O5
c10h18oEqFqjD	-410,39	719,68	294,97	364,53	423,88	473,81	548,65	595,47	629,89	C10H19O5
c10h18oEqFqjH	-416,62	720,53	297,22	367,57	425,53	473,02	543,99	594,9	723,62	C10H19O5
c10h18oEqFqjI	-418,88	720,54	297,23	367,57	425,53	473,02	543,99	594,9	723,62	C10H19O5
c10h18oFqBqjE	-418,88	714,76	297,23	367,56	425,52	473,02	544	594,89	723,62	C10H19O5
c10h18oFqCqjE	-416,62	720,52	297,25	367,53	425,51	473,03	544,01	594,86	723,56	C10H19O5
c10h18oFqDqj	-416,62	714,76	297,26	367,52	425,5	473,03	544,01	594,86	723,56	C10H19O5
c10h18oFqEqjD	-410,39	719,68	294,97	364,53	423,88	473,81	548,65	595,47	629,89	C10H19O5
c10h17oAoBqC	-512,62	670,34	275,22	341,27	396,99	443,88	516,36	567,8	643,09	C10H8O4
c10h17oAoBqD	-518,77	671,52	279,79	343,39	397,35	443,03	514,32	565,58	641,58	C10H8O4
c10h17oAoBqE	-518,77	671,52	279,79	343,39	397,35	443,03	514,32	565,58	641,58	C10H8O4
c10h17oAoCqD	-533,42	681,6	270,41	337,02	393,29	440,67	514,01	566,08	642,18	C10H8O4
c10h17oAoCqE	-539,57	682,77	275,04	339,03	393,33	439,31	511,14	562,89	640	C10H8O4
c10h17oAoCqF	-539,57	682,77	275,04	339,03	393,33	439,31	511,14	562,89	640	C10H8O4
c10h17oAoDqB	-540,41	679,84	280,05	342,8	396,07	441,21	511,88	563,09	640,14	C10H8O4
c10h17oAoDqC	-540,41	679,84	280,05	342,8	396,07	441,21	511,88	563,09	640,14	C10H8O4
c10h17oAoDqE	-540,41	679,84	280,05	342,8	396,07	441,21	511,88	563,09	640,14	C10H8O4
c10h17oAoEqD	-540,41	679,84	280,05	342,8	396,07	441,21	511,88	563,09	640,14	C10H8O4
c10h17oAoEqB	-540,41	679,84	280,05	342,8	396,07	441,21	511,88	563,09	640,14	C10H8O4
c10h17oBoCqA	-531,75	679,05	276,99	337,21	389,37	434,42	506,61	559,88	638,93	C10H8O4
c10h17oBoCqD	-550,07	679,51	269,35	335,19	391,18	438,64	512,67	565,56	642,33	C10H8O4
c10h17oBoCqE	-555,22	686,05	275,48	339,56	393,32	438,09	506,24	555,49	669,7	C10H8O4
c10h17oBoDqA	-546,27	685,74	274,73	336,27	389,19	434,58	506,73	559,65	638,64	C10H8O4
c10h17oBoDqE	-564,59	686,2	267,2	334,2	390,85	438,6	512,59	565,2	641,97	C10H8O4
c10h17oBoEqA	-553,25	683,98	282,7	341,66	392,43	436,07	505,73	557,26	635,38	C10H8O4
c10h17oBoEqC	-571,58	684,44	277,02	340,03	393,62	439,11	510,51	562,34	640,11	C10H8O4
c10h17oBoEqD	-571,58	684,44	277,02	340,03	393,62	439,11	510,51	562,34	640,11	C10H8O4
c10h17oBoEqF	-571,58	684,44	277,02	340,03	393,62	439,11	510,51	562,34	640,11	C10H8O4
c10h17oBoFqC	-571,58	684,44	277,02	340,03	393,62	439,11	510,51	562,34	640,11	C10H8O4
c10h17oBoFqE	-571,58	684,44	277,02	340,03	393,62	439,11	510,51	562,34	640,11	C10H8O4
c10h17oCoDqA	-537,57	691,15	275,14	338,69	391,84	436	503,27	552,85	677,86	C10H8O4
c10h17oCoDqB	-551,7	680,26	272,37	337,41	392,56	439,2	511,92	564,15	641,43	C10H8O4
c10h17oCoDqE	-551,7	680,26	272,37	337,41	392,56	439,2	511,92	564,15	641,43	C10H8O4
c10h17oCoDqF	-556,43	686,48	277,62	341,92	395,31	439,36	505,94	554,96	684,56	C10H8O4
c10h17oCoDqG	-556,43	686,48	277,62	341,92	395,31	439,36	505,94	554,96	684,56	C10H8O4
c10h17oCoEqB	-566,22	686,96	270,48	336,55	392,27	439,18	511,87	563,85	641,08	C10H8O4
c10h17oCoEqF	-566,22	686,96	270,48	336,55	392,27	439,18	511,87	563,85	641,08	C10H8O4
c10h17oCoFqD	-573,21	685,2	279,6	342,3	395,39	440,3	510,61	561,75	639,6	C10H8O4
c10h17oCoFqE	-573,21	685,2	279,6	342,3	395,39	440,3	510,61	561,75	639,6	C10H8O4
c10h17oCoGqD	-573,21	685,2	279,6	342,3	395,39	440,3	510,61	561,75	639,6	C10H8O4
c10h17oCoGqF	-573,21	685,2	279,6	342,3	395,39	440,3	510,61	561,75	639,6	C10H8O4
c10h17oDoEqA	-537,57	691,15	275,14	338,69	391,84	436	503,27	552,85	677,86	C10H8O4
c10h17oDoEqB	-558,68	686,48	277,65	341,88	395,28	439,37	505,96	554,93	684,54	C10H8O4
c10h17oDoEqC	-551,7	680,26	272,37	337,41	392,56	439,2	511,92	564,15	641,43	C10H8O4
c10h17oDoEqF	-551,7	680,26	272,37	337,41	392,56	439,2	511,92	564,15	641,43	C10H8O4
c10h17oDoEqG	-556,43	686,48	277,63	341,91	395,3	439,36	505,95	554,96	684,54	C10H8O4
c10h17oDoEqH	-556,43	686,48	277,63	341,91	395,3	439,36	505,95	554,96	684,54	C10H8O4
c10h17oDoFqC	-566,22	686,96	270,48	336,55	392,27	439,18	511,87	563,85	641,08	C10H8O4
c10h17oDoFqEq	-566,22	686,96	270,48	336,55	392,27	439,18	511,87	563,85	641,08	C10H8O4
Ec10h17oDoGqC	-573,21	685,2	279,6	342,3	395,39	440,3	510,61	561,75	639,6	C10H8O4
'c10h17oEoFqDq	-556,43	686,48	277,62	341,92	395,31	439,36	505,94	554,96	684,56	C10H8O4
ɴc10h17oEoFqHq	-551,7	680,26	272,37	337,41	392,56	439,2	511,92	564,15	641,43	C10H8O4
ʿc10h17oEoFqHq	-556,43	686,48	277,63	341,91	395,3	439,36	505,95	554,96	684,54	C10H8O4
c10h17oEoFqIqI	-558,68	686,48	277,63	341,91	395,3	439,36	505,95	554,96	684,54	C10H8O4
c10h19o2h	-227,49	621,98	259,03	321,1	376,44	424,17	496,92	546,93	638,12	C10H20O2
c10h21o2h	-352,8	631,72	269,84	335,58	394,3	445,08	523,02	577,23	676,07	C10H22O2
c9h19hco	-333,55	578,77	239,79	301,11	354,11	399,58	471,61	525,28	618,15	C10H20O
c9h19co	-188,79	454,64	158,66	192,54	219,9	241,87	273,73	295,41	332,1	C10H19O
c10h20oB	-363,45	575,08	237	298,49	351,69	397,47	470,33	524,56	627,05	C10H20O
c10h20oC	-364,66	575,5	239,15	300,83	353,68	398,75	470,04	524,01	642,53	C10H20O
c10h20oD	-364,66	575,5	239,16	300,83	353,67	398,75	470,05	524,01	642,21	C10H20O

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

c10h20oE	-364,66	575,5	239,16	300,83	353,67	398,75	470,05	524,01	642,21	C10H20O
c2h5cohco	-291,48	312,95	103,94	126,38	145,64	162,01	187,23	204,49	229,04	C4H6O2
c2h5coco	-143,77	299,3	96,59	117,56	135,66	151,07	174,68	190,53	212,56	C4H5O2
ch3coch2hco	-331,32	376,73	94,42	118,13	138,5	155,93	183,65	204,75	250,03	C4H6O2
ch3coch2co	-183,6	382,8	90,34	111,13	128,77	143,81	167,99	186,9	229,65	C4H5O2
choch2ch2cho	-292,67	367,37	107,94	128,99	146,67	161,64	185,57	204,08	235,43	C4H6O2
choch2ch2co	-132,64	377,1	106,93	123,63	138,39	151,39	172,77	189	213,68	C4H5O2
c3h7cohco	-312,17	352,1	126,82	155,49	180,13	201,11	233,57	256,1	290,51	C5H8O2
c3h7coco	-164,47	338,61	119,47	146,68	170,16	190,17	221,01	242,15	274,06	C5H7O2
c2h5coch2hco	-353,23	416,3	119,43	149,61	174,99	196,3	229,68	255,84	325,4	C5H8O2
c2h5coch2co	-205,51	422,41	115,36	142,6	165,25	184,18	214,03	237,98	306,16	C5H7O2
c5oAoD	-343,26	408,59	128,06	155,38	178,75	198,71	230,54	255,19	312,18	C5H8O2
c5oyAoD	-195,54	414,7	124	148,36	169,01	186,59	214,89	237,33	291,73	C5H7O2
c5oAoE	-313,36	406,52	130,84	158,03	181,17	200,8	231,84	255,85	314,47	C5H8O2
c5oyAoE	-165,64	418,4	126,75	151,04	171,44	188,68	216,18	238,01	294,14	C5H7O2
c4h9cohco	-332,87	391,26	149,68	184,61	214,63	240,2	279,9	307,73	351,81	C6H0O2
c4h9coco	-185,16	377,97	142,35	175,81	204,66	229,26	267,35	293,77	335,39	C6H9O2
nc3h7coch2hco	-373,92	455,45	142,3	178,72	209,48	235,39	276,02	307,46	387,29	C6H0O2
nc3h7coch2co	-226,2	461,59	138,21	171,73	199,76	223,26	260,35	289,62	367,61	C6H9O2
c6oAoD	-365,17	448,17	153,09	186,83	215,22	239,08	276,6	306,26	387,67	C6H10O2
c6oyAoD	-217,45	454,31	149,01	179,83	205,49	226,96	260,94	288,41	368,08	C6H9O2
c6oAoE	-363,96	447,74	150,95	184,48	213,23	237,81	276,88	306,8	373,7	C6H10O2
c6oyAoE	-216,24	453,89	146,88	177,45	203,49	225,69	261,23	288,93	353,15	C6H9O2
c5h11cohco	-353,56	430,4	172,55	213,73	249,13	279,3	326,23	359,34	413,42	C7H12O2
c5h11coco	-205,86	417,19	165,21	204,93	239,16	268,36	313,68	345,4	397,03	C7H11O2
c4h9coch2hco	-394,62	494,6	165,16	207,85	243,98	274,48	322,35	359,09	449,01	C7H12O2
c4h9coch2co	-246,9	500,77	161,11	200,82	234,23	262,37	306,7	341,21	429,1	C7H11O2
c3h7coc2h4hco	-385,86	487,32	175,98	215,93	249,7	278,18	322,94	357,86	449,52	C7H12O2
c3h7coc2h4co	-238,14	493,48	171,87	208,95	239,99	266,06	307,26	340,04	429,69	C7H11O2
c7oAoE	-385,86	487,32	175,98	215,93	249,7	278,18	322,94	357,86	449,52	C7H12O2
c7oyAoE	-238,14	493,48	171,87	208,95	239,99	266,06	307,26	340,04	429,69	C7H11O2
c6h13cohco	-374,26	469,55	195,41	242,86	283,63	318,38	372,56	410,97	474,78	C8H14O2
c6h13coco	-226,56	456,48	188,13	234,01	273,63	307,47	360,03	396,98	458,42	C8H13O2
c8oAoC	-415,31	533,75	188,05	236,94	278,46	313,58	368,7	410,68	510,62	C8H14O2
c8oyAoC	-267,59	539,94	183,97	229,94	268,73	301,46	353,04	392,84	490,52	C8H13O2
c8oAoD	-406,56	526,47	198,82	245,07	284,22	317,27	369,26	409,5	511,2	C8H14O2
c8oyAoD	-258,84	532,65	194,75	238,06	274,48	305,15	353,6	391,66	491,16	C8H13O2
c8oAoE	-406,56	526,47	198,82	245,07	284,22	317,27	369,26	409,5	511,2	C8H14O2
c8oyAoE	-258,84	532,65	194,75	238,06	274,48	305,15	353,6	391,66	491,16	C8H13O2
c9oAoB	-394,96	508,7	218,3	271,95	318,11	357,48	418,9	462,57	536,14	C9H16O2
c9oyAoB	-247,25	495,64	210,97	263,16	308,15	346,55	406,35	448,63	519,77	C9H15O2
c9oAoC	-436,01	572,9	210,92	266,06	312,96	352,68	415,03	462,3	572,25	C9H16O2
c9oyAoC	-288,29	579,1	206,82	259,08	303,24	340,55	399,36	444,47	552,06	C9H15O2
c9oAoD	-427,26	565,62	221,7	274,18	318,71	356,37	415,59	461,12	572,84	C9H16O2
c9oyAoD	-279,54	571,82	217,63	267,17	308,97	344,25	399,94	443,26	552,7	C9H15O2
c9oAoE	-427,26	565,62	221,7	274,18	318,71	356,37	415,59	461,12	572,84	C9H16O2
c9oyAoE	-279,54	571,82	217,63	267,17	308,97	344,25	399,94	443,26	552,7	C9H15O2
Fc6oC	-77,67	427,66	147,37	182,21	210,94	234,85	272,51	302,3	377,47	C6H11O
c6oCqjF	-218,67	487,16	172,27	211,4	243,96	270,95	312,2	343,12	423,58	C6H1O3
Dc6oCqF	-197,35	495,41	179,41	217,38	248,45	273,97	313,17	343,26	422,83	C6H1O3
c6oCqFqjD	-314,98	568,56	203,28	247,84	284,07	313,29	356	386,28	471,04	C6H1O5
c3h7coch2ch2	-77,67	427,66	147,37	182,21	210,94	234,85	272,51	302,3	377,47	C6H1O
c3h7coc2h4qj	-218,67	487,17	172,23	211,45	243,99	270,94	312,18	343,16	423,9	C6H1O3
c2h5chcoc2h4q	-197,35	495,63	179,37	217,39	248,45	273,96	313,15	343,27	423,12	C6H1O3
c3h7cochch2q	-197,35	495,67	179,39	217,4	248,47	273,97	313,15	343,28	423,14	C6H1O3
qc2h5chqjcoc2h4	-314,98	568,57	203,27	247,85	284,07	313,29	355,99	386,29	471,04	C6H1O5
c3h7cochqjch2q	-314,98	562,8	203,28	247,84	284,07	313,29	356	386,28	471,04	C6H1O5
Ac7oC	-98,37	466,84	170,24	211,33	245,44	273,94	318,84	353,92	438,82	C7H13O
c7oCqjA	-239,37	526,33	195,13	240,53	278,47	310,04	358,53	394,75	485,14	C7H13O3
Dc7oCqA	-218,04	534,75	202,27	246,52	282,96	313,06	359,49	394,9	484,35	C7H13O3
c7oCqAqjD	-335,67	601,96	226,16	276,94	318,55	352,39	402,34	437,89	532,52	C7H13O5
Ac7oD	-98,37	466,84	170,24	211,33	245,44	273,94	318,84	353,92	438,82	C7H13O
c7oDqjA	-239,37	526,33	195,13	240,53	278,46	310,04	358,53	394,74	485,14	C7H13O3
Cc7oDqA	-218,04	534,8	202,31	246,48	282,93	313,07	359,51	394,86	484,36	C7H13O3
c7oDqAqjC	-335,67	601,96	226,14	276,98	318,57	352,37	402,33	437,92	532,39	C7H13O5
Ac8oB	-128,75	493,11	190,13	238,23	279,22	314,1	369,26	410,48	489,82	C8H15O
c8oBqjA	-255	563,42	219,51	270,11	312,88	348,9	404,9	446,4	537,32	C8H15O3
Cc8oBqA	-233,68	571,77	226,7	276,05	317,34	351,93	405,89	446,5	536,52	C8H15O3
c8oBqAqjC	-351,31	644,79	250,55	306,51	352,96	391,24	448,71	489,53	584,95	C8H15O5
c5h11coc2h4	-119,06	506,02	193,11	240,44	279,93	313,04	365,17	405,54	500,35	C8H15O
c5h11coc2h4qj	-260,06	565,5	217,98	269,67	312,97	349,13	404,85	446,39	546,64	C8H15O3
c4h9chcoc2h4q	-238,74	573,99	225,16	275,63	317,45	352,16	405,83	446,5	545,86	C8H15O3
qc4h9chqjcoc2h4	-356,37	646,88	249	306,1	353,07	391,47	448,65	489,54	594,12	C8H15O5
Ac9oB	-149,44	532,29	213	267,37	313,72	353,19	415,59	462,11	551,06	C9H17O
c9oBqjA	-275,7	602,58	242,38	299,23	347,37	387,98	451,24	498,02	598,67	C9H17O3
Cc9oBqA	-254,37	611,05	249,55	305,21	351,86	391,02	452,21	498,16	597,88	C9H17O3
c9oBqAqjC	-372	683,95	273,39	335,66	387,47	430,33	495,03	541,18	646,44	C9H17O5
Ac9oC	-139,76	545,19	215,98	269,57	314,43	352,13	411,5	457,17	561,64	C9H17O
c9oCqjA	-280,76	604,66	240,84	298,8	347,48	388,22	451,18	498,02	607,84	C9H17O3
Dc9oCqA	-259,44	613,27	248,04	304,76	351,95	391,25	452,17	498,13	607,08	C9H17O3
c9oCqAqjD	-377,06	686,04	271,91	335,17	387,53	430,58	495,01	541,12	655,33	C9H17O5
cyc6h9	123,23	311,04	103,35	141,89	173,92	200,17	238,92	266,37	305,64	C6H9

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Annexe 4: Données thermodynamiques des espèces présentes dans le mécanisme

chxe1rD	189,34	334,88	95,71	130,67	160,91	186,93	228,12	257,66	299,46	C6H9
CHD13	106,06	295,91	115,11	148,18	174,54	195,7	227,19	249,85	283,73	C6H8
CHD14	109	302,03	94,98	128,47	156,82	180,71	217,69	243,85	281,82	C6H8
c6h7C	235,34	295,93	112,62	144,72	169,72	189,41	218,27	238,72	268,76	C6H7
cyc6h9o	49,04	344,38	113,43	153,62	187,06	214,72	256,32	284,58	323,95	C6H9O
chxe1qjC	47,83	381,95	129,58	169,62	203,1	231,02	273,71	303,69	347,64	C6H9O2
chxe1qjC	47,83	381,95	129,58	169,62	203,1	231,02	273,71	303,69	347,64	C6H9O2
Echxe1qC	90,72	399,61	131,52	171,93	205,77	233,98	276,84	306,38	347,68	C6H9O2
chxe1qCqjE	-55,11	448,69	164,57	209,81	246,79	276,9	321,32	351,2	393,79	C6H9O4
chxe1oCqE	-222,98	415,47	144,77	183,13	215,17	241,84	282,34	310,39	350,19	C6H8O3
chxe1oCojE	-70,71	378,81	119,97	154,72	183,78	208,01	244,87	270,44	307,24	C6H7O2
Fc6e3oAoE	-78,12	432,25	135,45	166,79	192,94	214,67	247,68	270,62	303,66	C6H7O2
Dc6e5oAoC	-45,82	438,23	132,55	164,79	191,54	213,66	247	269,96	303,04	C6H7O2
Fc6e5oA	120,59	416,97	134,85	165,05	190,53	212,06	246,07	271,68	323,4	C6H9O
Fc6e2oA	46,53	412,62	134,36	166,8	194,09	217,02	252,43	277,65	315,32	C6H9O
Fc6h9-13	261,31	381,45	120,18	151,69	177,89	199,66	232,95	256,66	293,87	C6H9
hex135	165,87	332,07	118,01	149,4	174,77	195,25	225,36	246,13	279,12	C6H8
ac3h4hco1	171,77	327,14	87,26	107,16	124,03	138,27	160,34	175,88	197,8	C4H5O
sc3h5co	11,34	312,11	92,54	110,83	126,17	139	158,83	173,08	195,01	C4H5O
Ac6h9-15	331,74	385,59	119,52	149,72	175,29	196,9	230,57	254,84	291,82	C6H90
CPD	134,3	274,15	75,86	102,34	126,04	145,68	172,48	191,91	219,06	C5H6
c5h5	266,1	279,48	77,1	102,39	123,74	140,7	162,98	178,92	201,07	C5H5
c5h4oh	51,5	310,15	92,77	119,96	141,39	158,22	182,13	198,47	220,83	C5H5O
c5h5o	221,75	302,92	83,63	110,43	132,78	151,08	177,74	196,16	222,94	C5H5O
c5h4o	C55.23	289,97	81,37	103,32	122,13	137,71	160,35	176,68	199,82	C5H4O
cyc5h7	218,06	209,86	94,66	120,94	143,05	161,39	188,82	208,54	237,32	C5H7
cyc5h8	32,7	291,26	81,81	111,07	138,5	162,06	195,61	220,35	255,55	C5H8
hex1245	395,17	328,15	112,6	138,45	158,58	174,51	198,25	215,4	241,52	C6H6
c6h615	414	339,46	111,99	134,43	152,39	167,22	191,09	210,06	244,13	C6H6
Mc6h6	336,19	299,3	106,76	141,95	166,34	183,84	208,4	225,07	249	C6H6
FULVENE	223,64	299,3	106,86	141,51	166,21	184,2	209,01	225,46	247,78	C6H6
che24one	-53,31	217,21	116,36	147,81	173,16	193,51	223,06	242,77	271,87	C6H6O
c6h6	82,9	269,32	83,33	113,33	139,11	160,57	191,92	213,57	243,97	C6H6
c6h5	332,39	292,18	87,92	113,23	135,71	155,02	183,67	199,86	222,84	C6H5
c6h5o	43,34	313,32	103,71	131,01	155,15	175,78	206,06	222,92	246,76	C6H5O
c6h5oh	-104,63	321,96	106,41	134,34	159,35	181,07	213,88	232,96	260,41	C6H6O
c6h4o2	-130,12	327,68	0	0	0	0	0	0	0	C6H4O2
toluen	50	320,18	103,93	138,5	169,83	196,32	234,05	261,27	299,46	C7H8
phch2	210,5	321,13	109,75	142,37	170,81	194,4	227,98	251,95	285,49	C7H7
phch2oh	-100,64	365,35	117,94	153,49	184,14	210,03	249,39	278,08	320,67	C7H8O
phch2o	113,8	343,57	103,98	142,35	174,34	200,83	240,42	267,07	312,26	C7H7O

phhco	-36,6	348,68	108,58	139,18	166,65	190,16	225,14	249,86	284,19	C7H6O
phco	109	354,54	107,85	136,34	161,56	182,89	214,11	235,84	265,34	C7H5O
hoc6h4ch3	-128,75	353,16	126,66	163,7	194,33	219,57	257,44	283,44	321,6	C7H8O
oc6h4ch3	15,19	327,39	120,18	155,58	184,98	209,26	245,59	270,03	303,83	C7H7O
phc2h5	29,35	359,52	129,06	171,29	206,24	235,37	280,62	313,01	359,35	C8H0
Aphc2h4	230,67	363,46	128,91	168,57	201,36	228,42	269,26	297,27	341,09	C8H9
Bphc2h4	168,73	358,62	125,92	163,97	196,58	224,27	267,07	296,79	343,01	C8H9
styren	147,46	344,4	122,52	160,53	191,96	217,71	255,97	283,31	323,06	C8H8
ASTYRYL	387,21	343,87	120,29	155,17	184,06	207,87	243,32	267,01	305,26	C8H7
BSTYRYL	344,51	339,85	114,58	148,34	177,51	202,31	240,24	265,9	306,93	C8H7
phc2h	327,46	332,37	115,68	149,33	178,14	201,12	231,4	255,44	288,7	C8H6
c6h4c2h3	392,2	345,8	118,39	154,16	183,13	206,44	240,08	261,86	291,32	C8H7
phch2hco	-45,57	397,77	128,28	168,05	201,53	229,61	272,64	302,6	344,93	C8H8O
phch2co	108,84	402,46	124,8	162,05	193,34	219,51	259,41	286,99	325,53	C8H7O
phcoch2	371,61	395,84	130,46	166,85	197,32	222,71	261,35	288,07	325,92	C8H7O
c6h5cco	231,86	402	136,11	164,54	188,79	209,34	241,16	263,26	293,27	C8H15O
pbz	8	394,26	151,8	198,88	239,26	273,56	326,46	362,93	417,51	C9H12
pbzjA	209,27	403,06	151,5	196,71	234,51	266,04	314,26	347,7	397,7	C9H11
pbzjB	204,67	403,72	150,89	195,12	232,37	263,66	311,89	345,75	396,44	C9H11
pbzjC	47,33	397,16	149,19	193,1	230,48	262,16	311,46	346,17	398,41	C9H11
BPHPROPY	193,03	397,37	152,24	198,84	237,37	269,16	316,99	349,82	404,72	C9H11
phc3h5-1	136,29	400,62	137,77	182,62	220,28	251,8	300,16	334,15	383,72	C9H10
phc3h5-2	114,49	395,89	144,86	187,92	224,17	254,61	301,5	334,61	383,22	C9H10
phc3h4	265,54	385,17	142,65	185,21	220,57	249,82	293,99	324,48	368,45	C9H9
phc3h3	72,1	483,01	154,58	195,52	229,39	257,26	298,73	326,44	363,11	C9H8
phc2h4hco	-71,76	428,57	158,35	202,88	240,31	271,66	319,73	353,35	401,89	C9H0O
phc2h4co	82,64	433,25	154,86	196,87	232,12	261,56	306,5	337,73	382,44	C9H9O
phch2coch2	102,1	444,09	152,3	194,41	229,82	259,49	305,07	337,11	383,6	C9H9O
phcoc2h4	349,35	436,02	156,24	198,3	233,51	262,89	307,82	339,33	385,36	C9H9O
phc2h2hco	10	395,97	151,73	194,5	229,61	258,31	300,9	329,73	371,19	C9H8O
phc2h2co	172,9	403,01	129,98	172,33	209,17	240,79	290,2	325,76	395,32	C9H7O
phcoc2h3	25,35	428,17	141,63	179,23	212,66	241,87	287,6	316,41	329,5	C9H8O
Bphc3h5ohA	53,04	456,24	164,11	210,38	248,67	280,41	328,85	362,75	416,74	C9H1O
Aphc3h5ohB	41,13	450,91	167,45	213,65	252,83	285,8	335,55	366,31	371,98	C9H1O
Cphc3h5ohB	-23,74	446,72	165,34	210,36	249	281,88	332,23	363,96	371,91	C9H1O
Bphc3h5ohC	39,04	469,49	157,95	206,06	246,42	280,12	331,43	366,8	416,86	C9H1O
pbzohAqjB	-93,23	517,86	191,97	242,85	285,17	320,19	372,82	408,5	456,71	C9H1O3
pbzohBqjA	-93,23	517,86	191,97	242,85	285,17	320,19	372,82	408,5	456,71	C9H1O3
pbzohBqjC	-106,78	518,57	191,17	243,68	287,08	322,74	375,76	411,21	458,56	C9H1O3
pbzohCqjB	-106,78	518,57	191,17	243,68	287,08	322,74	375,76	411,21	458,56	C9H1O3
Cophc3h4-1	187,96	427,02	149,27	195,66	233,84	265,12	311,47	342,54	386,27	C9H9O

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Annexe 4: Données thermodynamiques des espèces présentes dans le mécanisme

Aophc3h4-2	185,23	408,8	148,09	194,78	232,85	263,66	308,73	340,18	420,41	C9H9O
ch3c6h4c2h3	115,28	388,52	145,41	186,65	221,91	251,97	299,25	333,4	383,6	C9H0
ch3c6h4c2h5	-2,68	403,92	152,56	198,9	238,46	272,09	324,7	362,3	417,15	C9H2
c14h14	143,14	483,27	206,46	276,65	333,89	380,85	452,16	502,38	571,56	C4H4
NAPHT	150,6	333,3	133,23	179,75	219,27	251,71	297,88	329,14	371,76	C10H8
BIPHENYL	182,15	388,86	167,69	222,64	269,51	308,15	363,51	401,13	452,4	C2H0
c10h9	229,53	363,66	144,21	192,12	233,62	267,66	314,8	347,97	393,6	C10H9
c10h10	117,15	359,38	144,89	194,48	238,3	274,72	325,7	361,87	411,98	C10H0
U-c6h5	589,8	332,85	112,53	133,34	151,76	167,55	191	204,74	225,64	C6H5
c6h4c2h	559	329,81	112,89	144,86	170,32	190,59	219,96	240,08	269,31	C8H5
A1c2hAC	613,06	396,91	153,24	192,12	223,62	249,13	286,86	313,17	351,91	C10H7
A2-X	394,95	349,1	132,09	175,39	211,28	240,63	283,63	312,83	354,55	C10H7
A2O	45,59	430,11	85,26	128,05	165,07	196,33	243,84	279,41	370,7	C10H7O
A2oh	-33,73	377,82	159,17	202,78	240,45	272,09	318,9	350,56	431,37	C10H8O
A1c2h3AC	439,97	435,39	152,87	189,51	218,11	239,68	269,44	302	338,49	C10H9
INDENYL	336,58	392,69	71,15	117,93	158,86	193,84	247,66	286,92	343,76	C9H7
phc4h9	-12,17	439,32	175,15	229,52	275,44	314,12	373,87	416,12	478,06	C10H40
Aphc4h8	192,86	453,63	171,91	223,74	267,43	304,14	360,66	400,46	458,6	C10H30
Bphc4h8	181,77	457,9	168,53	219,62	263,13	300,03	357,42	398	456,16	C10H30
Cphc4h8	181,77	457,9	168,53	219,62	263,13	300,03	357,42	398	456,16	C10H30
Dphc4h8	131,77	423,97	178,85	229,72	272,76	309,04	365,19	404,93	462,77	C10H30
Dphsecb	187,04	463,05	171,05	223,51	267,62	304,59	361,36	401,28	459,77	C10H30
phc4h7-3	94,57	422	166,43	216,67	258,88	294,23	348,54	386,82	443,24	C10H20
phc4h7-2	103,36	430,78	159,6	209,88	252,49	288,47	344,33	384,07	442,25	C10H20
phc4h7-1	113,98	432,25	163,42	214,66	257,55	293,32	347,85	385,84	441,23	C10H20
Bphc4h6-3	288,51	440,58	159,62	206,75	246,63	280,24	332,15	368,69	421,34	C10H10
Cphc4h6-1	307,93	450,83	156,86	204,78	245,23	279,22	331,39	367,72	419,34	C10H10
Dphc4h6-1	257,93	416,89	167,23	215,01	255,01	288,38	339,27	374,71	425,98	C10H10
phc4h5	204,16	398,44	160,82	208,65	247,89	279,98	327,76	360,49	409,18	C10H10
phc4h8ojA	55,44	483,47	184,35	238,57	284,17	322,38	381,05	422,22	481,93	C10H13O
phc4h8ojB	37,16	475,14	186,79	241,71	287,56	325,72	383,76	424,14	482,89	C10H13O
phc4h8ojC	37,16	475,14	186,79	241,71	287,56	325,72	383,76	424,14	482,89	C10H13O
phc4h8ojD	41,89	475,06	183,31	239,38	286,16	325,05	383,97	424,62	482,78	C10H13O
phc4h8qjA	50,05	522,51	200,52	254,83	300,66	339,22	398,85	441,19	503,09	C10H13O2
phc4h8qjB	35,95	516,77	202,57	257,79	304,02	342,62	401,69	443,22	504,1	C10H13O2
phc4h8qjC	35,95	516,77	202,57	257,79	304,02	342,62	401,69	443,22	504,1	C10H13O2
phc4h8qjD	40,67	516,69	199,76	255,65	302,52	341,72	401,78	443,97	505,19	C10H13O2
bbzqA	-101,01	521,59	209,08	367,97	389,03	408,51	443,04	472,2	525,5	C10H14O2
bbzqB	-115,11	515,85	210,49	371,86	392,6	411,77	445,76	474,46	526,9	C10H14O2
bbzqC	-115,11	515,85	210,49	371,86	392,6	411,77	445,76	474,46	526,9	C10H14O2
bbzqD	-110,38	515,77	207,76	372,82	393,6	412,81	446,84	475,55	527,92	C10H14O2

bbzqDrD	63,27	545,9	208,55	262,37	307,68	345,73	404,36	445,79	506,03	C10H13O2
bbzqDrC	83,56	534,35	201,42	258	305,38	344,9	405,07	446,76	505,92	C10H13O2
bbzqDrB	83,56	534,35	201,42	258	305,38	344,9	405,07	446,76	505,92	C10H13O2
bbzqDrA	94,65	526,69	204,49	262,02	309,73	349,16	408,56	449,48	508,4	C10H13O2
bbzqCrD	28,83	500,5	214,2	270,28	316,79	355,24	413,17	453,08	510,48	C10H13O2
bbzqCrC	55,92	527,1	209,28	262,04	306,23	343,17	399,07	434,53	448,07	C10H13O2
bbzqCrB	78,84	534,43	204,22	260,12	306,86	345,78	404,95	445,93	504,59	C10H13O2
bbzqCrA	89,92	526,78	207,52	264,36	311,39	350,2	408,57	448,81	507,39	C10H13O2
bbzqBrD	28,83	500,5	214,2	270,28	316,79	355,24	413,17	453,08	510,48	C10H13O2
bbzqBrC	78,84	534,43	204,22	260,12	306,86	345,78	404,95	445,93	504,59	C10H13O2
bbzqBrB	55,92	527,1	209,28	262,04	306,23	343,17	399,07	434,53	448,07	C10H13O2
bbzqBrA	89,92	526,78	207,52	264,36	311,39	350,2	408,57	448,81	507,39	C10H13O2
bbzqArD	42,93	506,23	212,69	267,22	312,99	351,27	409,85	450,77	509,2	C10H13O2
bbzqArC	92,94	540,17	201,86	257,03	303,47	342,42	402,14	443,79	503,01	C10H13O2
bbzqArB	92,94	540,17	201,86	257,03	303,47	342,42	402,14	443,79	503,01	C10H13O2
bbzqArA	-67,41	576,65	225,18	285,58	336,31	378,24	439,12	474,95	496,38	C10H13O2
bbzqDqjC	-62,26	596,57	234,83	295,89	346,24	387,61	449,4	491,51	551,38	C10H13O4
bbzqDqjB	-62,26	596,57	234,83	295,89	346,24	387,61	449,4	491,51	551,38	C10H13O4
bbzqDqjA	-43,98	599,17	232,44	292,83	342,92	384,32	446,67	489,52	550,41	C10H13O4
bbzqCqjD	-62,26	596,57	234,83	295,89	346,24	387,61	449,4	491,51	551,38	C10H13O4
bbzqCqjB	-66,99	596,66	237,22	297,83	347,7	388,57	449,47	490,95	550,54	C10H13O4
bbzqCqjA	-48,7	599,25	235,19	295,2	344,79	385,63	446,9	488,97	549,56	C10H13O4
bbzqBqjD	-62,26	596,57	234,83	295,89	346,24	387,61	449,4	491,51	551,38	C10H13O4
bbzqBqjC	-66,99	596,66	237,22	297,83	347,7	388,57	449,47	490,95	550,54	C10H13O4
bbzqBqjA	-48,7	599,25	235,19	295,2	344,79	385,63	446,9	488,97	549,56	C10H13O4
bbzqAqjD	-43,98	599,17	232,44	292,83	342,92	384,32	446,67	489,52	550,41	C10H13O4
bbzqAqjC	-48,7	599,25	235,19	295,2	344,79	385,63	446,9	488,97	549,56	C10H13O4
bbzqAqjB	-48,7	599,25	235,19	295,2	344,79	385,63	446,9	488,97	549,56	C10H13O4
bbzoCqD	-217,25	541,16	-56,42	146,7	818,65	1645,32	2955,43	3328,12	3449,46	C10H12O3
bbzoBqD	-221,77	541,59	211,52	267,66	314,44	353,29	412,18	452,94	511,06	C10H12O3
bbzoAqD	-190,6	546,11	214,75	270,45	316,81	355,27	413,49	453,75	511,33	C10H12O3
bbzoDqC	26,91	532,42	213,89	271,63	319,25	358,37	416,74	456,38	512,62	C10H12O3
bbzoBqC	-220,35	540,5	210,23	267,84	315,56	354,93	414	454,35	511,49	C10H12O3
bbzoAqC	-195,32	546,19	217,56	272,64	318,37	356,23	413,42	452,97	510,15	C10H12O3
bbzoDqB	20,76	533,6	218,22	273,67	319,62	357,58	414,78	454,23	511,2	C10H12O3
bbzoCqB	-221,98	541,25	213,21	270,23	317,29	356,02	414,04	453,83	511,21	C10H12O3
bbzoAqB	-189,17	545,02	213,42	270,66	318	356,98	415,35	455,14	511,65	C10H12O3
bbzoDqA	39,04	536,19	215,88	270,61	316,27	354,25	411,98	452,17	510,08	C10H12O3
bbzoCqA	-209,84	545,02	214,99	269,12	314,3	351,92	409,31	449,59	508,59	C10H12O3
bbzoBqA	-202,02	543,43	217,02	269,81	314,24	351,53	408,99	449,65	508,75	C10H12O3
bbzohDrC	8,41	499,74	180,79	235,11	280,83	319,13	377,71	418,36	476,15	C10H13O

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

bbzohCrD	-36,32	465,89	194,41	247,39	291,71	328,66	385,07	424,57	482,66	C10H13O
bbzohCrB	13,68	499,83	183,72	237,14	282,06	319,69	377,34	417,62	476,04	C10H13O
bbzohBrC	207,63	518,41	175,58	227,43	270,59	306,43	360,81	398,68	454,47	C10H13O
bbzohArB	31,97	508,15	181,49	234,15	278,8	316,47	374,68	415,5	473,85	C10H13O
bbzohBrA	24,77	501,29	187,2	241,29	286,35	323,77	380,56	420,08	478,5	C10H13O
bbzohDqjC	-127,41	560,29	214,85	273,12	321,43	361,38	421,72	463,58	524,89	C10H13O3
bbzohCqjD	-127,41	560,29	214,85	273,12	321,43	361,38	421,72	463,58	524,89	C10H13O3
bbzohCqjB	-132,14	560,38	217,65	275,25	322,93	362,28	421,63	462,82	523,78	C10H13O3
bbzohBqjC	-132,14	560,38	217,65	275,25	322,93	362,28	421,63	462,82	523,78	C10H13O3
bbzohAqjB	-113,85	562,97	215,42	272,26	319,62	358,97	418,87	460,83	522,83	C10H13O3
bbzohBqjA	-113,85	562,97	215,42	272,26	319,62	358,97	418,87	460,83	522,83	C10H13O3
bbze3ojB	148,21	450,08	177,05	229,38	272,42	307,68	360,01	395,29	445,56	C10H11O
bbze1ojC	67,63	460,33	170,16	226,58	272,25	309	362,07	396,61	445,2	C10H11O
bbze1ojD	168,05	462,25	171,56	224,52	268,27	304,25	357,96	394,35	445,94	C10H11O
bbzoA	-92,39	467,98	181,37	232,06	274,81	310,72	366,04	405,02	461,78	C10H12O
bbzoB	-123,56	463,47	178,43	229,37	272,41	308,66	364,73	404,46	462,48	C10H12O
bbzoC	-125,19	464,22	181,02	231,57	274,13	309,84	364,82	403,6	460,3	C10H12O
bbzoD	123,69	455,39	182,46	233,25	276,02	311,95	367,37	406,64	464,42	C10H12O
phc3h6co	62,01	478,45	177,88	226,06	266,61	300,61	352,81	389,41	442,36	C10H1O
phhcco	121,2	229,63	100,99	133,32	160,36	182,69	215,49	236,5	269,32	C8H6O
phc4h7o-AB	5,23	452,88	169,07	227,34	274,94	313,68	370,94	409,79	467,34	C10H12O
phc4h7o-AC	0,96	438,11	161,01	220,14	268,77	308,64	368,06	408,64	468,22	C10H12O
phc4h7o-AD	-80,51	408,82	147,3	209,5	260,86	303,08	366,11	408,86	469,77	C10H12O
phc4h7o-BC	-13,05	450,28	171,78	230,49	278,22	316,88	373,66	411,98	469,04	C10H12O
phc4h7o-BD	-12,59	435,39	161,06	221,19	270,53	310,87	370,83	411,66	471,44	C10H12O
phc4h7o-CD	-8,33	450,2	168,93	228,32	276,7	315,96	373,74	412,75	470,23	C10H12O
bbzoArB	65,36	466,6	183,89	230,61	270,02	303,16	354,33	390,59	443,98	C10H1O
bbzoArC	101,56	492,34	174,99	222,34	262,65	296,79	349,74	386,97	439,55	C10H1O
bbzoArD	51,55	458,4	184,93	232,29	272,22	305,75	357,38	393,73	446,55	C10H1O
bbzoBrA	53,44	473,51	179,84	229,92	271,63	306,25	358,72	395,11	448,07	C10H1O
bbzoBrC	53,44	473,51	179,84	229,92	271,63	306,25	358,72	395,11	448,07	C10H1O
bbzoBrD	20,38	463,01	182,15	229,61	269,74	303,56	355,94	393,14	447,56	C10H1O
bbzoCrA	85,4	492,88	170,87	220,18	261,78	296,77	350,8	389,03	444,56	C10H1O
bbzoCrB	57,37	477,11	175,41	226,57	269,17	304,53	358,16	395,41	449,54	C10H1O
bbzoCrD	14,69	465,39	174,84	222,8	263,63	298,29	352,49	391,37	448,34	C10H1O
bbzoDrA	91,1	458,99	180,97	229,9	270,77	304,83	356,88	393,53	448	C10H1O
bbzoDrB	80,01	466,65	177,16	225,69	266,61	300,97	353,76	390,68	443,56	C10H1O
bbzoDrC	63,06	443,21	185,59	236,21	278,01	312,41	364,12	399,89	453,07	C10H1O
cyc6h12	-123,64	296,76	114,1	156,29	195,38	229,47	280,65	317,02	367,48	C6H12
cyc6h11	75,11	317,29	109,27	149,88	186,9	218,91	266,82	300,82	348,15	C6H11
cyc6h10	-3,55	311,03	105,79	145,45	178,79	206,41	247,74	277,42	320,73	C6H110

chxone	-230,14	322,16	110,12	151,93	188,57	220,41	271,17	307,26	354,25	C6H10O
Bchxone	-61,93	327,09	107,03	146,85	181,49	211,38	258,64	291,98	335,11	C6H9O
Cchxone	-35,15	327,39	108,35	148,37	183,03	212,83	259,72	292,68	335,46	C6H9O
Dchxone	-31,8	327,39	108,35	148,37	183,03	212,83	259,72	292,68	335,46	C6H9O
chxe2oA	-120,05	348,73	109,09	142,74	171,58	196,19	234,87	262,66	302,99	C6H8O
chxe3oA	-115,95	342,41	110,81	144,89	173,88	198,45	236,69	263,88	303,3	C6H8O
Dchxe2oA	20,13	332,79	102,72	135,13	162,86	186,46	223,34	249,5	286,2	C6H7O
chxqjA	-87,16	379,02	133,18	177,48	215,89	248,97	301,23	338,32	388,39	C6H1O2
chxqArC	-32,97	402,41	133,93	179,64	218,9	252,36	304,46	340,63	387,45	C6H1O2
chxo-AC	-37,78	261,99	83,64	131,21	171,28	204,8	255,83	290,69	338,43	C6H0O
chxqAqjC	-190,3	449,45	168,49	216,56	257,53	292,21	345,76	382,76	431,89	C6H1O4
chxoAqC	-339,94	408,73	147,57	191,69	229,49	261,66	311,71	346,61	392,67	C6H0O3
chxqAqCrE	-136,12	467,11	174,35	222,23	263,02	297,52	350,52	386,69	432,98	C6H1O4
chxoAojC	-187,46	368,39	123,17	164,58	200,04	230,22	277,2	310,06	353,76	C6H9O2
Fc6oAoC	-164,99	445,18	145,39	178,45	206,78	231	269,2	296,85	336,99	C6H9O2
Fc6oAoE	-182,48	451	154,4	185,62	212,42	235,34	271,5	297,62	335,5	C6H9O2
c6e5oAqC	-225,07	485,94	173,73	209,62	239,92	265,43	304,93	333,08	374,94	C6H0O3
c6e5oAojC	-72,6	445,6	149,18	182,46	210,48	234,03	270,44	296,41	335,46	C6H9O2
Fc6e1oC	34,94	421,08	134,74	165,34	191,45	213,71	248,97	274,99	315,37	C6H9O
c6e5oA	-121,93	415,51	138,05	170,39	198,29	222,29	260,49	288,47	330,3	C6H0O
c6e5oyA	32,47	420,2	134,57	164,39	190,1	212,18	247,27	272,86	310,82	C6H9O
Ac6e5oC	55,44	410,66	130,72	162,74	190,11	213,45	250,23	276,91	316,27	C6H9O
Ac6e5oB	23,89	415,26	136,59	168,28	195,13	217,82	253,18	278,65	317	C6H9O
chxoqjB	-177,92	416,64	145,64	186,15	220,16	248,64	292,53	323,71	369,94	C6H9O3
DchxoqB	-135,03	434,3	147,01	188,29	222,92	251,84	295,86	326,19	368,34	C6H9O3
chxoqBqjD	-280,85	483,38	181,96	226,4	263,42	294,1	340,26	371,51	413,04	C6H9O5
chxoAoBqD	-413,71	455,1	158,91	196,72	228,86	256,06	298,38	328,45	371,4	C6H8O4
chxoAoBojD	-261,44	418,44	133,93	168,28	197,57	222,43	261,14	288,52	327,41	C6H7O3
c6e5oAoB	-207,17	430,91	139,71	171,22	197,97	220,59	255,74	280,76	317,32	C6H8O2
c6e5oyAoB	-52,76	435,6	136,26	165,24	189,78	210,47	242,52	265,21	298,14	C6H7O2
Fc6oAoDoE	-273,99	470,95	154,21	183,2	208,1	229,42	263,14	287,62	322,99	C6H7O3
Fc6oAoCoD	-240,6	489,24	143,49	173,54	199,46	221,72	257,07	282,75	319,86	C6H7O3
Ac6e3e5oB	106,54	379,11	128	158,9	183,94	204,2	234,09	254,69	287,25	C6H7O
chxoAoD	-348,68	369,57	135,96	167,15	194,09	217,31	254,46	281,92	323,38	C6H8O2
BchxoAoD	-186,26	370,53	120,43	156,11	186,19	211,42	250,34	278,77	340,7	C6H7O2
chxe2oAoD	-284,83	250,15	135,09	164,29	188,42	208,34	238,56	259,92	292,46	C6H6O2
c6e1oCoyF	-95,9	434,38	140,75	167,68	190,66	210,23	241,13	263,78	298,01	C6H7O2
Echxe2oAoD	-107,83	245,29	130,42	157,66	180,07	198,47	226,09	245,27	273,71	C6H5O2
c6e2e5oyAo	-48,87	390,66	130,95	158,05	179,86	197,36	222,78	239,89	265,95	C6H5O2
ch2coch2hco	-150,13	355,59	101,1	124,14	143,46	159,54	183,85	200,26	221,66	C4H5O2
mch	-150,81	338,98	135,66	186,31	230,47	268,61	328,88	371,63	431,34	C7H14

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Annexe 4: Données thermodynamiques des espèces présentes dans le mécanisme

mchA	50,47	347,73	135,33	184,18	225,74	261,08	316,66	356,41	411,75	C7H13
mchB	47,54	346,15	134,06	181,96	223,18	258,55	314,6	354,81	410,88	C7H13
mche1	-35,12	337,16	122,84	171,83	213,79	249,34	303,83	340,89	393,85	C7H12
Amche1	207,99	341,48	120,04	166,81	206,23	239,28	289,77	324,28	373,58	C7H11
Cmche1	107,92	323,62	112,01	158,47	198,49	232,72	286,31	323,87	373,71	C7H1
Dmche1	166,29	369,99	122,27	163,55	199	229,31	276,95	311,03	360,2	C7H1
BmchohA	-118,63	399,07	139,36	188,44	231,08	267,86	326,19	367,85	425,13	C7H13O
mchohAqjB	-245,95	539,24	170,22	223,33	269,72	309,9	373,76	419,07	478,21	C7H13O3
mche13	71,8	324,67	120,64	163,07	198,22	227,29	271,19	301,73	347,08	C7H10
mche14	84,69	342,83	121,72	161,33	194,81	223,01	266,63	297,54	343,15	C7H10
Emche13	174,56	325,38	120,95	162,09	196,07	223,73	263,48	288,17	329,17	C7H9
Gmche13	174,56	325,38	120,95	162,09	196,07	223,73	263,48	288,17	329,17	C7H9
Fmche14	224,87	326,89	115,48	153,72	186,01	213,16	255,02	284,43	326,77	C7H9
Gmche14	224,87	326,89	115,48	153,72	186,01	213,16	255,02	284,43	326,77	C7H9
mche135	183,99	317,55	117,02	154,03	184,29	208,99	245,69	270,96	310,98	C7H8
mche136	157,25	292,53	119,28	157,65	188,59	213,45	249,53	273,67	309,94	C7H8
mche1oC	-145,28	364,46	124,47	168,34	206,02	238,2	288,64	324,38	373,4	C7H0O
mchoA	-232,02	371,07	129,93	179,27	221,96	258,61	316,29	356,93	411,34	C7H2O
mche2oA	-143,06	349,77	123,59	170,79	210,68	244,16	295,14	329,68	374,32	C7H0O
chxco	-77,62	375,76	126,47	173,28	213,76	248,5	303,05	341,33	391,96	C7H1O
mche2oya	11,34	354,46	120,09	164,78	202,5	234,07	281,95	314,12	354,9	C7H9O
mchoAoC	-341,86	408,69	142,7	186,17	223,14	254,47	303,28	338,06	388,36	C7H0O2
mchoyAoC	-187,46	413,38	139,07	180,09	214,91	244,35	290,05	322,43	368,9	C7H9O2
mchoAoD	-345,04	395,97	135,25	183,59	224,47	258,75	310,72	345,34	386,84	C7H0O2
mchoyAoD	-190,64	400,66	131,85	178,93	218,31	250,93	299,46	330,92	367,42	C7H9O2
AmchoD	-57,16	398,4	141,04	182,89	218,64	249,07	296,79	331,08	381,32	C7H1O
AmchoC	-59,79	387,35	126,17	172,97	213,28	247,77	301,83	339,87	391	C7H1O
Ec5oA	-25,87	391,74	125,12	153,41	176,89	196,57	227,75	251,89	303,05	C5H9O
Gc7h13-1	142,69	446,31	151,73	191,29	225,4	254,72	301,4	335,67	387,45	C7H30
c7e6oyA	11,84	459,62	157,58	193,58	224,59	251,23	293,57	324,53	370,77	C7H1O
Gc7e1oC	2,22	462,21	158,17	194,55	225,72	252,38	294,75	326,07	374,49	C7H1O
Ec5e1oC	53,48	383,37	112,08	136,1	156,66	174,24	202,16	222,76	254,21	C5H7O
Ac7e6oB	3,27	454,68	159,64	197,47	229,61	256,85	299,47	330,28	376,75	C7H1O
Gc7e1oD	34,82	472,13	153,54	190,68	222,48	249,67	292,76	324,41	372,53	C7H1O
Ac5e4oB	49,17	376,76	109,28	136,3	159	178,02	207,27	227,98	258,61	C5H7O
Gc7e1oF	3,27	454,68	159,83	197,49	229,56	256,78	299,46	330,28	376,15	C7H1O
ech	-172,04	381,6	159,38	216,94	266,8	309,59	376,68	424,06	494,62	C8H6
echA	28,97	391,37	159,07	214,79	262,05	302,07	364,47	408,83	475	C8H5
eche1	-44,14	372,57	157,5	210,95	257,3	297,1	359,37	402,9	463,59	C8H4
Aeche1	201,9	377,13	154,81	205,86	249,59	286,87	345,16	386,18	443,27	C8H13
Ceche1	83,77	358,52	132,11	184,13	229,31	268,27	329,89	373,61	432,28	C8H13

eche1e3	51,18	364,09	143,7	192,24	232,68	266,29	317,43	353,25	406,56	C8H12
eche2oA	-156,12	404,96	141,08	196,77	245	286,45	351,81	398,66	469,77	C8H12O
echoA	-254,62	409,7	156,65	210,93	257,94	298,35	362,08	407,16	468,06	C8H14O
echoyA	-100,21	414,38	153,19	204,94	249,75	288,26	348,89	391,64	448,87	C8H13O2
AechoB	-106,83	410,24	151,39	206,25	253,24	293,22	355,34	398,55	455,81	C8H13O2
AechoE	-77,79	437,81	163,92	212,03	253,14	288,15	343,1	382,65	440,8	C8H13O2
eche1oE	-155,61	410,7	155,5	203,09	243,41	277,46	330,33	367,99	423,43	C8H2O
AechoD	-80,42	426,77	149,22	202,16	247,77	286,81	348,14	391,54	450,78	C8H13O2
echoAoD	-365,67	435,39	158,73	210,54	255,19	293,43	353,49	395,98	453,73	C8H2O2
echoyAoD	-211,27	440,07	155,24	204,55	247	283,31	340,25	380,38	434,36	C8H1O2
pch	-189,94	417,28	181,44	244,51	299,42	346,8	421,65	474,8	550,56	C9H8
pchA	11,34	426,09	181,13	242,36	294,67	339,28	409,44	459,58	530,89	C9H7
pchB	6,73	426,75	180,5	240,79	292,55	336,88	407,06	457,65	529,62	C9H7
pchC	6,73	426,75	180,93	241,64	293,31	337,33	406,91	457,17	528,77	C9H7
pchD	8,41	424,51	179,84	240,15	292,12	336,74	407,37	457,99	530,01	C9H7
pchE	8,41	428,33	180,05	240,86	293,48	338,69	409,9	460,38	532,12	C9H7
pchF	8,41	428,33	180,05	240,86	293,48	338,69	409,9	460,38	532,12	C9H7
pch	0,41	422,57	180,05	240,86	293,48	338,69	409,9	460,38	532,12	C9H7
pchqjA	-128,63	496,44	198,68	262,97	318,41	365,99	441,13	494,99	570,64	C9H17O2
pchqjB	-146,91	497,23	201,24	266,01	321,64	369,2	443,92	497,22	572,05	C9H17O2
pchqjC	-146,91	497,23	201,24	266,01	321,64	369,2	443,92	497,22	572,05	C9H17O2
pchqjD	-157,08	492,76	202,75	267,43	322,92	370,3	444,67	497,72	572,41	C9H17O2
pchqjE	-146,91	497,23	201,24	266,01	321,64	369,2	443,92	497,22	572,05	C9H17O2
pchqjF	-146,91	497,23	201,24	266,01	321,64	369,2	443,92	497,22	572,05	C9H17O2
pchqjG	-146,91	497,23	201,24	266,01	321,64	369,2	443,92	497,22	572,05	C9H17O2
pchqA	-279,68	495,52	207,27	275,1	333,31	382,98	460,76	515,82	591,92	C9H8O2
pchqB	-297,97	496,31	209,76	278,11	336,53	386,19	463,57	518,08	593,39	C9H8O2
pchqC	-297,97	496,31	209,76	278,11	336,53	386,19	463,57	518,08	593,39	C9H8O2
pchqD	-308,13	491,84	211,49	279,79	338,03	387,47	464,35	518,49	593,59	C9H8O2
pchqE	-297,97	496,31	209,76	278,11	336,53	386,19	463,57	518,08	593,39	C9H8O2
pchqF	-297,97	496,31	209,76	278,11	336,53	386,19	463,57	518,08	593,39	C9H8O2
pchqG	-297,97	496,31	209,76	278,11	336,53	386,19	463,57	518,08	593,39	C9H8O2
pchojA	-127,41	458,86	182,5	246,64	301,88	349,15	423,44	476,14	549,19	C9H7O
pchojB	-145,7	459,66	185,08	249,77	305,16	352,35	426,06	478,14	550,72	C9H7O
pchojC	-145,7	459,66	185,08	249,77	305,16	352,35	426,06	478,14	550,72	C9H7O
pchojD	-155,87	455,18	186,89	251,34	306,51	353,5	426,9	478,8	551,21	C9H7O
pchojE	-145,7	459,66	185,08	249,77	305,16	352,35	426,06	478,14	550,72	C9H7O
pchojF	-145,7	459,66	185,08	249,77	305,16	352,35	426,06	478,14	550,72	C9H7O
pchojG	-145,7	459,66	185,08	249,77	305,16	352,35	426,06	478,14	550,72	C9H7O
ApchqA	-95,99	511,5	207,75	271,46	326,36	373,4	447,4	499,98	572,34	C9H17O2
BpchqA	-74,65	507,07	204,5	269,61	325,45	373,08	447,57	500,18	572,45	C9H17O2

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

CpchqA	-85,74	514,1	200,14	265,08	321,11	369,13	444,54	497,72	569,6	C9H17O2
DpchqA	-94,73	508,45	205,82	269,72	324,8	372,01	446,32	499,14	571,86	C9H17O2
EpchqA	-85,74	514,1	200,14	265,08	321,11	369,13	444,54	497,72	569,6	C9H17O2
FpchqA	-85,74	514,1	200,14	265,08	321,11	369,13	444,54	497,72	569,6	C9H17O2
GpchqA	-85,74	514,1	200,14	265,08	321,11	369,13	444,54	497,72	569,6	C9H17O2
ApchqB	-92,93	507,74	206,95	272,66	328,76	376,4	450,47	502,48	573,91	C9H17O2
BpchqB	-124,32	521,34	209,65	272,3	326,42	372,89	446,3	498,78	571,63	C9H17O2
CpchqB	-92,93	507,86	207	272,64	328,69	376,3	450,35	502,38	573,85	C9H17O2
DpchqB	-113,02	509,24	208,3	272,76	328,07	375,27	449,13	501,36	573,24	C9H17O2
EpchqB	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
FpchqB	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
GpchqB	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
ApchqC	-92,93	507,23	206,49	272,33	328,52	376,22	450,37	502,41	573,88	C9H17O2
BpchqC	-92,93	507,86	207	272,64	328,69	376,3	450,35	502,38	573,85	C9H17O2
CpchqC	-124,32	521,34	209,65	272,3	326,42	372,89	446,3	498,78	571,63	C9H17O2
DpchqC	-113,02	509,24	208,3	272,76	328,07	375,27	449,13	501,36	573,24	C9H17O2
EpchqC	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
FpchqC	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
GpchqC	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
ApchqD	-103,1	502,76	208,24	274	330,01	377,49	451,16	502,85	574,14	C9H17O2
BpchqD	-114,19	510,41	204,53	269,77	325,74	373,45	447,95	500,33	571,66	C9H17O2
CpchqD	-103,1	503,39	208,73	274,28	330,15	377,53	451,13	502,81	574,1	C9H17O2
EpchqD	-103,1	503,39	208,73	274,28	330,15	377,53	451,13	502,81	574,1	C9H17O2
FpchqD	-114,19	510,41	204,53	269,77	325,74	373,45	447,95	500,33	571,66	C9H17O2
GpchqD	-114,19	510,41	204,53	269,77	325,74	373,45	447,95	500,33	571,66	C9H17O2
ApchqE	-92,93	507,23	206,49	272,33	328,52	376,22	450,37	502,41	573,88	C9H17O2
BpchqE	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
CpchqE	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
DpchqE	-113,02	509,24	208,3	272,76	328,07	375,27	449,13	501,36	573,24	C9H17O2
EpchqE	-124,32	521,34	209,65	272,3	326,42	372,89	446,3	498,78	571,63	C9H17O2
FpchqE	-92,93	507,86	207	272,64	328,69	376,3	450,35	502,38	573,85	C9H17O2
GpchqE	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
HpchqE	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
ApchqF	-92,93	507,23	206,49	272,33	328,52	376,22	450,37	502,41	573,88	C9H17O2
BpchqF	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
CpchqF	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
DpchqF	-113,02	509,24	208,3	272,76	328,07	375,27	449,13	501,36	573,24	C9H17O2
EpchqF	-92,93	507,86	207	272,64	328,69	376,3	450,35	502,38	573,85	C9H17O2
FpchqF	-124,32	521,34	209,65	272,3	326,42	372,89	446,3	498,78	571,63	C9H17O2
GpchqF	-92,93	507,86	207	272,64	328,69	376,3	450,35	502,38	573,85	C9H17O2
ApchqG	-92,93	507,23	206,49	272,33	328,52	376,22	450,37	502,41	573,88	C9H17O2
BpchqG	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
CpchqG	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
DpchqG	-113,02	509,24	208,3	272,76	328,07	375,27	449,13	501,36	573,24	C9H17O2
EpchqG	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
FpchqG	-92,93	507,86	207	272,64	328,69	376,3	450,35	502,38	573,85	C9H17O2
GpchqG	-124,32	521,34	209,65	272,3	326,42	372,89	446,3	498,78	571,63	C9H17O2
IpchqE	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
HpchqF	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
IpchqF	-104,02	514,89	202,35	268,08	324,41	372,4	447,21	499,64	570,81	C9H17O2
pchqAqjA	-255,12	557,11	237,9	306,3	364,67	414,21	491,18	545,12	618,67	C9H17O4
pchqAqjB	-231,56	563,18	234,17	303,22	361,95	411,66	488,7	542,74	617,31	C9H17O4
pchqAqjC	-231,56	563,18	234,17	303,22	361,95	411,66	488,7	542,74	617,31	C9H17O4
pchqAqjD	-241,73	558,7	236,33	304,91	363,27	412,7	489,38	543,28	617,8	C9H17O4
pchqAqjE	-231,56	563,18	234,17	303,22	361,95	411,66	488,7	542,74	617,31	C9H17O4
pchqAqjF	-231,56	563,18	234,17	303,22	361,95	411,66	488,7	542,74	617,31	C9H17O4
pchqAqjG	-231,56	563,18	234,17	303,22	361,95	411,66	488,7	542,74	617,31	C9H17O4
pchqBqjA	-231,56	563,18	234,17	303,22	361,95	411,66	488,7	542,74	617,31	C9H17O4
pchqBqjB	-269,34	555,02	237,26	305,34	363,49	412,89	489,82	543,97	618,32	C9H17O4
pchqBqjC	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqBqjD	-260,01	559,5	238,35	307,86	366,62	416,08	492,21	545,3	618,81	C9H17O4
pchqBqjE	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqBqjF	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqBqjG	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqCqjA	-231,56	563,18	234,17	303,22	361,95	411,66	488,7	542,74	617,31	C9H17O4
pchqCqjB	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqCqjC	-269,34	555,02	237,26	305,34	363,49	412,89	489,82	543,97	618,32	C9H17O4
pchqCqjD	-260,01	559,5	238,35	307,86	366,62	416,08	492,21	545,3	618,81	C9H17O4
pchqCqjE	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqCqjF	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqCqjG	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqDqjA	-241,73	558,7	236,33	304,91	363,27	412,7	489,38	543,28	617,8	C9H17O4
pchqDqjB	-260,01	559,5	238,35	307,86	366,62	416,08	492,21	545,3	618,81	C9H17O4
pchqDqjC	-260,01	559,5	238,35	307,86	366,62	416,08	492,21	545,3	618,81	C9H17O4
pchqDqjE	-260,01	559,5	238,35	307,86	366,62	416,08	492,21	545,3	618,81	C9H17O4
pchqDqjF	-260,01	559,5	238,35	307,86	366,62	416,08	492,21	545,3	618,81	C9H17O4
pchqDqjG	-260,01	559,5	238,35	307,86	366,62	416,08	492,21	545,3	618,81	C9H17O4
pchqEqjA	-231,56	563,18	234,17	303,22	361,95	411,66	488,7	542,74	617,31	C9H17O4
pchqEqjB	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqEqjC	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqEqjD	-260,01	559,5	238,35	307,86	366,62	416,08	492,21	545,3	618,81	C9H17O4
pchqEqjE	-269,34	555,02	237,26	305,34	363,49	412,89	489,82	543,97	618,32	C9H17O4

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

pchqEqjF	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqEqjG	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqEqjH	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqEqjI	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqFqjA	-231,56	563,18	234,17	303,22	361,95	411,66	488,7	542,74	617,31	C9H17O4
pchqFqjB	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqFqjC	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqFqjD	-260,01	559,5	238,35	307,86	366,62	416,08	492,21	545,3	618,81	C9H17O4
pchqFqjE	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqFqjF	-269,34	555,02	237,26	305,34	363,49	412,89	489,82	543,97	618,32	C9H17O4
pchqFqjG	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqFqjH	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqFqjI	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqGqjA	-231,56	563,18	234,17	303,22	361,95	411,66	488,7	542,74	617,31	C9H17O4
pchqGqjB	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqGqjC	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqGqjD	-260,01	559,5	238,35	307,86	366,62	416,08	492,21	545,3	618,81	C9H17O4
pchqGqjE	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqGqjF	-249,85	563,98	236,34	306,24	365,34	415,06	491,53	544,77	618,32	C9H17O4
pchqGqjG	-269,34	555,02	237,26	305,34	363,49	412,89	489,82	543,97	618,32	C9H17O4
pchoAqB	-372,03	514,68	211,89	278,77	335,6	383,6	457,65	509,04	578,42	C9H16O3
pchoAqC	-378,18	515,85	216,12	280,74	335,93	382,79	455,69	506,9	577,01	C9H16O3
pchoAqD	-388,35	511,38	217,63	282,24	337,3	383,99	456,47	507,33	577,13	C9H16O3
pchoAqE	-378,18	515,85	216,12	280,74	335,93	382,79	455,69	506,9	577,01	C9H16O3
pchoBqA	-384,88	518,83	214,97	277,77	331,9	378,3	451,38	503,43	575,02	C9H16O3
pchoBqC	-403,2	519,29	208,7	275,95	333,17	381,55	456,3	508,24	578,22	C9H16O3
pchoBqD	-419,52	515,98	214,64	279,49	334,87	381,91	455,12	506,6	577,12	C9H16O3
pchoBqE	-409,35	520,46	212,96	277,95	333,51	380,76	454,35	506,1	576,82	C9H16O3
pchoBqF	-409,35	520,46	212,96	277,95	333,51	380,76	454,35	506,1	576,82	C9H16O3
pchoCqA	-390,73	521,21	208,91	274,55	330,62	378,27	452,42	504,55	575,85	C9H16O3
pchoCqB	-402,87	520,83	207,17	275,61	333,53	382,27	457,09	508,75	578,46	C9H16O3
pchoCqD	-407,47	511,13	213,16	279,46	336	383,92	458,13	509,78	579,08	C9H16O3
pchoCqE	-409,02	522,01	211,42	277,6	333,87	381,47	455,13	506,61	577,05	C9H16O3
pchoCqF	-409,02	522,01	211,42	277,6	333,87	381,47	455,13	506,61	577,05	C9H16O3
pchoCqG	-409,02	522,01	211,42	277,6	333,87	381,47	455,13	506,61	577,05	C9H16O3
pchoEqA	-390,73	521,21	208,91	274,55	330,62	378,27	452,42	504,55	575,85	C9H16O3
pchoEqB	-407,89	521,25	208,43	275,21	332,14	380,39	455,1	507,13	577,33	C9H16O3
pchoEqC	-407,89	521,25	208,43	275,21	332,14	380,39	455,1	507,13	577,33	C9H16O3
pchoEqD	-407,47	511,13	213,16	279,46	336	383,92	458,13	509,78	579,08	C9H16O3
pchoEqF	-402,87	520,83	207,17	275,61	333,53	382,27	457,09	508,75	578,46	C9H16O3
pchoEqG	-407,89	521,25	208,43	275,21	332,14	380,39	455,1	507,13	577,33	C9H16O3
pchoEqH	-407,89	521,25	208,43	275,21	332,14	380,39	455,1	507,13	577,33	C9H16O3
pchoEqI	-409,02	522,01	211,42	277,6	333,87	381,47	455,13	506,61	577,05	C9H16O3
pchoFqA	-388,1	532,26	223,84	284,51	335,96	379,48	447,3	495,95	567,78	C9H16O3
pchoFqB	-406,38	533,05	226,74	287,67	339,15	382,55	449,91	498,09	569,46	C9H16O3
pchoFqC	-410,99	521,21	215,92	280,32	335,23	381,84	454,39	505,58	576,53	C9H16O3
pchoFqD	-421,15	516,73	217,05	281,69	336,64	383,13	455,23	505,92	576,28	C9H16O3
pchoFqE	-404,83	520,04	211,59	278,28	334,86	382,62	456,33	507,71	577,94	C9H16O3
pchoFqG	-404,83	520,04	211,59	278,28	334,86	382,62	456,33	507,71	577,94	C9H16O3
pchoFqH	-410,99	521,21	215,92	280,32	335,23	381,84	454,39	505,58	576,53	C9H16O3
pchoFqI	-410,99	521,21	215,92	280,32	335,23	381,84	454,39	505,58	576,53	C9H16O3
pchoGqC	-410,99	521,21	215,92	280,32	335,23	381,84	454,39	505,58	576,53	C9H16O3
pchoGqD	-421,15	516,73	217,05	281,69	336,64	383,13	455,23	505,92	576,28	C9H16O3
pchoGqE	-410,99	521,21	215,92	280,32	335,23	381,84	454,39	505,58	576,53	C9H16O3
pchoGqF	-404,83	520,04	211,59	278,28	334,86	382,62	456,33	507,71	577,94	C9H16O3
pchoAojB	-219,76	478,03	187,13	250,37	304,19	349,73	420,14	469,16	535,99	C9H15O2
pchoAojC	-225,91	479,2	190,8	252,19	304,62	349,15	418,33	466,79	533,29	C9H15O2
pchoAojD	-236,08	474,72	192,63	253,74	305,96	350,3	419,14	467,22	532,58	C9H15O2
pchoBojA	-232,61	482,17	190,33	249,39	300,53	344,53	414,01	463,41	530,82	C9H15O2
pchoBojC	-250,93	482,63	184,41	247,7	301,71	347,56	418,72	468,48	536,32	C9H15O2
pchoBojD	-267,25	479,32	189,59	250,98	303,5	348,16	417,69	466,48	533,25	C9H15O2
pchoBojE	-257,09	483,8	187,93	249,47	302,14	346,97	416,9	466,15	534,02	C9H15O2
pchoCojA	-238,46	484,55	184,06	246,06	299,16	344,37	414,9	464,54	532,71	C9H15O2
pchoCojB	-250,6	484,18	183,07	247,39	302,04	348,21	419,46	469,04	536,72	C9H15O2
pchoCojD	-255,2	474,47	188,19	250,94	304,56	350,06	420,59	469,58	535,24	C9H15O2
pchoCojE	-256,75	485,35	187,36	249,41	302,4	347,42	417,52	466,9	535,3	C9H15O2
pchoCojF	-256,75	485,35	187,36	249,41	302,4	347,42	417,52	466,9	535,3	C9H15O2
pchoEojA	-238,46	484,55	184,06	246,06	299,16	344,37	414,9	464,54	532,71	C9H15O2
pchoEojB	-256,75	485,35	187,36	249,41	302,4	347,42	417,52	466,9	535,3	C9H15O2
pchoEojC	-256,75	485,35	187,36	249,41	302,4	347,42	417,52	466,9	535,3	C9H15O2
pchoEojD	-255,2	474,47	188,19	250,94	304,56	350,06	420,59	469,58	535,24	C9H15O2
pchoEojF	-250,6	484,18	183,07	247,39	302,04	348,21	419,46	469,04	536,72	C9H15O2
pchoEojG	-256,75	485,35	187,36	249,41	302,4	347,42	417,52	466,9	535,3	C9H15O2
pchoEojH	-256,75	485,35	187,36	249,41	302,4	347,42	417,52	466,9	535,3	C9H15O2
pchoEojI	-256,75	485,35	187,36	249,41	302,4	347,42	417,52	466,9	535,3	C9H15O2
pchoFojA	-235,83	495,6	198,86	255,95	304,51	345,67	409,86	455,66	522,64	C9H15O2
pchoFojB	-254,11	496,4	201,53	259,14	307,82	348,84	412,51	458,05	526,11	C9H15O2
pchoFojC	-258,72	484,56	190,41	251,69	303,97	348,31	417,17	465,44	531,83	C9H15O2
pchoFojD	-268,88	480,08	192,53	253,35	305,26	349,32	417,83	465,94	532,29	C9H15O2
pchoFojE	-252,57	483,38	186,58	249,83	303,53	348,88	418,9	467,75	535,07	C9H15O2
pchoFojG	-252,57	483,38	186,58	249,83	303,53	348,88	418,9	467,75	535,07	C9H15O2
pchoFojH	-258,72	484,56	190,41	251,69	303,97	348,31	417,17	465,44	531,83	C9H15O2

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

pchoFojI	-258,72	484,56	190,41	251,69	303,97	348,31	417,17	465,44	531,83	C9H15O2
pchoGojD	-268,88	480,08	192,53	253,35	305,26	349,32	417,83	465,94	532,29	C9H15O2
pchoGojE	-258,72	484,56	190,41	251,69	303,97	348,31	417,17	465,44	531,83	C9H15O2
pchoGojF	-252,57	483,38	186,58	249,83	303,53	348,88	418,9	467,75	535,07	C9H15O2
ApchohB	-158,08	476,69	185,92	249,45	303,88	350,27	422,81	474,19	546,26	C9H17O
BpchohA	-150,89	483,55	179,18	242,26	296,69	343,39	416,96	469,28	541,44	C9H17O
BpchohC	-169,17	484,35	182,25	245,25	299,61	346,23	419,62	471,71	543,8	C9H17O
CpchohB	-169,17	484,35	182,25	245,25	299,61	346,23	419,62	471,71	543,8	C9H17O
CpchohD	-179,34	479,87	184,05	246,86	301,07	347,55	420,53	472,02	542,26	C9H17O
DpchohC	-178,17	478,7	187,72	249,88	303,43	349,31	421,58	473,15	545,62	C9H17O
DpchohE	-178,17	478,7	187,72	249,88	303,43	349,31	421,58	473,15	545,62	C9H17O
EpchohD	-179,34	479,87	184,05	246,86	301,07	347,55	420,53	472,02	542,26	C9H17O
EpchohF	-169,17	484,35	182,25	245,25	299,61	346,23	419,62	471,71	543,8	C9H17O
FpchohE	-169,17	484,35	182,25	245,25	299,61	346,23	419,62	471,71	543,8	C9H17O
FpchohG	-169,17	484,35	182,25	245,25	299,61	346,23	419,62	471,71	543,8	C9H17O
GpchohF	-169,17	484,35	182,25	245,25	299,61	346,23	419,62	471,71	543,8	C9H17O
pcho-AB	-180,6	424,93	173,46	238,45	293,83	340,77	413,54	464,46	534,7	C9H16O
pcho-BC	-198,88	425,72	175,53	241,39	297,15	344,12	416,36	466,51	535,77	C9H16O
pcho-CD	-209,05	421,25	177,71	243,09	298,48	345,15	417,03	467,06	536,33	C9H16O
pcho-DE	-209,05	421,25	177,6	243,01	298,45	345,18	417,09	466,97	535,24	C9H16O
pcho-EF	-198,88	425,72	175,43	241,32	297,13	344,15	416,41	466,43	534,7	C9H16O
pcho-FG	-198,88	425,72	175,43	241,32	297,13	344,15	416,41	466,43	534,7	C9H16O
pcho-AC	-184,15	406,52	165,52	233,04	290,42	338,89	413,71	465,78	537,32	C9H16O
pcho-AD	-279,43	393,67	161,93	230,93	289,48	338,87	414,92	467,63	539,69	C9H16O
pcho-AE	-292,44	274,67	152,94	223,68	283,11	332,76	408,18	459,77	531,03	C9H16O
pcho-AF	-268,84	355,47	157,48	228,02	288,39	339,72	419,47	475,01	548,37	C9H16O
pcho-BD	-212,61	402,83	169,74	237,69	295,08	343,3	417,22	468,37	538,89	C9H16O
pcho-BE	-287,55	398,94	162,66	232,44	291,44	341,03	416,98	469,25	540,03	C9H16O
pcho-BF	-313,24	369,86	157,8	229,2	289,54	340,24	417,74	470,84	541,81	C9H16O
pcho-BG	-287,13	356,26	159,76	231,04	291,74	343,11	422,33	476,95	548,2	C9H16O
pcho-CE	-202,44	407,31	167,56	235,98	293,78	342,32	416,6	467,74	537,27	C9H16O
pcho-CF	-287,55	398,94	162,57	232,38	291,43	341,06	417,03	469,16	538,93	C9H16O
pcho-CG	-313,24	369,86	157,71	229,14	289,54	340,28	417,8	470,75	540,65	C9H16O
pcho-DF	-212,61	402,83	169,59	237,59	295,07	343,38	417,34	468,2	536,68	C9H16O
pcho-DG	-297,72	394,46	164,62	234,01	292,74	342,15	417,78	469,61	538,28	C9H16O
pcho-EG	-202,44	407,31	167,44	235,9	293,75	342,34	416,65	467,65	536,16	C9H16O
pcho-EI	-202,44	407,31	167,44	235,9	293,75	342,34	416,65	467,65	536,16	C9H16O
pcho-FH	-202,44	407,31	167,44	235,9	293,75	342,34	416,65	467,65	536,16	C9H16O
pcho-EH	-243,32	432,63	168,74	234,73	289,56	335,02	403,94	452,02	523,55	C9H16O
ApchoB	-129,42	448,86	177,99	237,93	289,27	332,98	401,09	448,87	514,04	C9H15O
BpchoA	-117,49	441,96	182,4	238,73	287,57	329,68	396,46	444,35	511,06	C9H15O

ApchoC	-101,05	466,19	172,28	231,36	282,26	325,87	394,45	443,2	510,5	C9H15O
CpchoA	-81,3	467,69	172,71	230,49	280,56	323,69	391,96	440,67	507,09	C9H15O
DpchoA	-89,46	471,04	175,5	230,21	278,29	320,28	388,06	437,59	506,5	C9H15O
ApchoE	-96,45	478,03	183,31	238,77	286,15	326,51	389,94	435,74	503,5	C9H15O
EpchoA	-81,3	467,69	172,71	230,49	280,56	323,69	391,96	440,67	507,09	C9H15O
ApchoF	-98,41	477,23	186,92	241,22	287,64	327,2	389,41	434,34	500,84	C9H15O
FpchoA	-81,3	467,69	172,71	230,49	280,56	323,69	391,96	440,67	507,09	C9H15O
BpchoC	-129,09	450,41	176,75	237,67	289,58	333,57	401,79	449,55	515,3	C9H15O
CpchoB	-129,42	448,86	177,99	237,93	289,27	332,98	401,09	448,87	514,04	C9H15O
DpchoB	-120,63	475,64	172,51	227,44	275,81	318,13	386,65	436,93	507,22	C9H15O
EpchoB	-112,47	472,29	169,57	227,69	278,11	321,6	390,56	439,84	507,05	C9H15O
BpchoE	-107,54	485,68	179,18	234,5	282,13	322,91	387,15	433,11	498,73	C9H15O
BpchoF	-109,5	484,89	183,78	237,27	283,49	323,25	386,31	431,9	497,87	C9H15O
FpchoB	-112,47	472,29	169,57	227,69	278,11	321,6	390,56	439,84	507,05	C9H15O
BpchoG	-109,5	484,89	183,78	237,27	283,49	323,25	386,31	431,9	497,87	C9H15O
GpchoB	-112,47	472,29	169,57	227,69	278,11	321,6	390,56	439,84	507,05	C9H15O
DpchoC	-129,09	450,41	176,75	237,67	289,58	333,57	401,79	449,55	515,3	C9H15O
CpchoE	-107,54	485,68	179,18	234,5	282,13	322,91	387,15	433,11	498,73	C9H15O
EpchoC	-112,14	473,84	168,66	227,24	278,14	322,02	391,37	440,46	506,37	C9H15O
CpchoF	-109,5	484,89	183,78	237,27	283,49	323,25	386,31	431,9	497,87	C9H15O
FpchoC	-112,14	473,84	168,66	227,24	278,14	322,02	391,37	440,46	506,37	C9H15O
CpchoG	-109,5	484,89	183,78	237,27	283,49	323,25	386,31	431,9	497,87	C9H15O
GpchoC	-112,14	473,84	168,66	227,24	278,14	322,02	391,37	440,46	506,37	C9H15O
DpchoE	-124,48	462,25	187,93	245,1	293,44	334,18	397,29	442,09	507,68	C9H15O
DpchoF	-117,66	488,24	186,63	236,97	281,16	319,78	382,44	428,99	497,78	C9H15O
DpchoG	-117,66	488,24	186,63	236,97	281,16	319,78	382,44	428,99	497,78	C9H15O
EpchoF	-126,45	461,46	191,54	247,55	294,92	334,87	396,76	440,69	505,01	C9H15O
FpchoE	-124,48	462,25	187,93	245,1	293,44	334,18	397,29	442,09	507,68	C9H15O
EpchoG	-109,5	484,89	183,78	237,27	283,49	323,25	386,31	431,9	497,87	C9H15O
GpchoE	-107,54	485,68	179,18	234,5	282,13	322,91	387,15	433,11	498,73	C9H15O
EpchoH	-109,5	484,89	183,78	237,27	283,49	323,25	386,31	431,9	497,87	C9H15O
HpchoE	-107,54	485,68	179,18	234,5	282,13	322,91	387,15	433,11	498,73	C9H15O
IpchoE	-107,54	485,68	179,18	234,5	282,13	322,91	387,15	433,11	498,73	C9H15O
FpchoG	-126,45	461,46	191,54	247,55	294,92	334,87	396,76	440,69	505,01	C9H15O
GpchoF	-126,45	461,46	191,54	247,55	294,92	334,87	396,76	440,69	505,01	C9H15O
HpchoF	-109,5	484,89	183,78	237,27	283,49	323,25	386,31	431,9	497,87	C9H15O
pche1	-68,87	413,38	162,04	222,79	275,09	319,84	390,12	439,95	509	C9H16
pche2	-80,13	419,03	160,97	221,1	273,05	317,66	388,07	438,26	507,98	C9H16
pche3	-85,11	425,64	161,58	222,21	274,39	319,03	389,2	439,07	508,59	C9H16
pche4	-80,51	437,48	172,52	229,56	278,26	319,7	384,72	431,53	500,62	C9H16
pche5	-74,81	432,46	170,65	228,08	277,11	318,84	384,3	431,36	500,64	C9H16

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Annexe 4: Données thermodynamiques des espèces présentes dans le mécanisme

pche6	-75,86	432,46	170,31	227,79	276,9	318,71	384,31	431,47	500,78	C9H16
Apche2	70,93	408,31	158,99	218,54	269,51	312,89	380,53	428,1	493,31	C9H15
Dpche2	50,84	403,59	153,85	211,45	261,63	305,07	374,15	423,59	490,85	C9H15
Cpche4	59,67	421,54	166,2	221,87	269,4	309,84	373,19	418,55	484,24	C9H15
Dpche5	56,16	417,02	161,45	217,79	265,93	306,92	371,18	417,24	483,88	C9H15
Epche6	64,32	416,52	164,38	220,31	268,14	308,89	372,79	418,54	484,47	C9H15
Fpche7	64,32	416,52	164,38	220,31	268,14	308,89	372,79	418,54	484,47	C9H15
pche2ojA	-6,9	448,32	169,99	230,25	282,09	326,4	395,74	444,5	510,86	C9H15O
pche1ojC	-15,23	441,46	172,71	235,71	288,96	333,7	402,08	448,94	512,13	C9H15O
pche2ojD	-42,72	447,23	176,45	237,45	289,29	333,08	400,55	447,23	510,69	C9H15O
pche3ojB	-31,46	453,72	172,37	235,15	288,22	332,79	400,99	447,85	511,49	C9H15O
pche4ojC	-26,86	465,56	182,98	242,22	291,82	333,17	396,15	439,85	502,96	C9H15O
pche3ojE	-31,46	453,72	172,37	235,15	288,22	332,79	400,99	447,85	511,49	C9H15O
pche5ojD	-37,41	460,66	185,65	244,26	293,33	334,26	396,63	440,01	503,07	C9H15O
pche4ojF	-26,86	465,56	182,98	242,22	291,82	333,17	396,15	439,85	502,96	C9H15O
pche6ojE	-22,22	460,54	180,88	240,55	290,53	332,22	395,72	439,77	503,25	C9H15O
pche5ojG	-21,17	460,54	180,88	240,68	290,7	332,38	395,77	439,68	503,05	C9H15O
pche7ojF	-22,22	460,54	180,88	240,55	290,53	332,22	395,72	439,77	503,25	C9H15O
Ao2pchohB	-296,71	532,63	214,16	280,49	337,22	385,51	461,05	514,76	590,64	C9H17O3
Bo2pchohA	-296,71	532,63	214,16	280,49	337,22	385,51	461,05	514,76	590,64	C9H17O3
Bo2pchohC	-315	533,43	215	283,41	341,17	389,77	464,71	517,38	592,39	C9H17O3
Co2pchohB	-315	533,43	215	283,41	341,17	389,77	464,71	517,38	592,39	C9H17O3
Co2pchohD	-325,16	528,95	218,47	285,15	341,86	389,88	464,53	517,36	592,27	C9H17O3
Do2pchohC	-325,16	528,95	218,47	285,15	341,86	389,88	464,53	517,36	592,27	C9H17O3
Do2pchohE	-325,16	528,95	218,47	285,15	341,86	389,88	464,53	517,36	592,27	C9H17O3
Eo2pchohD	-325,16	528,95	218,47	285,15	341,86	389,88	464,53	517,36	592,27	C9H17O3
Eo2pchohF	-315	533,43	215	283,41	341,17	389,77	464,71	517,38	592,39	C9H17O3
Fo2pchohE	-315	533,43	215	283,41	341,17	389,77	464,71	517,38	592,39	C9H17O3
Fo2pchohG	-315	533,43	215	283,41	341,17	389,77	464,71	517,38	592,39	C9H17O3
Go2pchohF	-315	533,43	215	283,41	341,17	389,77	464,71	517,38	592,39	C9H17O3
pche1e3	23,06	389,78	158,61	214,94	262,97	303,7	366,98	411,43	473,18	C9H14
pche2e4	9,46	496,94	165,15	220,65	267,92	308,02	370,49	414,78	476,66	C9H14
pche3e5	75,53	404,67	157,12	211,53	257,22	295,41	353,78	394,44	454,04	C9H14
pche4e6	24,31	422,33	166,54	221	266,47	304,33	362,09	402,61	462,83	C9H14
pche5e7	36,11	425,26	163,07	216,53	261,69	299,72	358,51	400,18	461,45	C9H14
pchoA	-275,25	449,11	179,65	240,12	292,43	337,41	408,39	458,85	528,1	C9H16O
pchoyA	-120,84	453,8	176,16	234,12	284,24	327,3	395,16	443,23	508,66	C9H15O
pchoB	-306,42	453,72	176,67	237,37	289,97	335,27	406,97	458,18	528,78	C9H16O
pchoC	-306,08	455,26	175,5	237,13	290,28	335,85	407,67	458,86	529,91	C9H16O
pchoE	-306,08	455,26	175,5	237,13	290,28	335,85	407,67	458,86	529,91	C9H16O
pchoF	-308,05	454,47	179,46	239,69	291,74	336,47	407,1	457,5	527,32	C9H16O
pchoG	-308,05	454,47	179,46	239,69	291,74	336,47	407,1	457,5	527,32	C9H16O
DpchqBqE	-198,92	583,22	249,13	316,25	372,83	420,15	491,71	539,36	603,68	C9H17O4
FpchqBqE	-202,27	581,28	249,35	316,93	374,17	422,11	494,25	541,74	605,81	C9H17O4
GpchqBqE	-198,92	581,28	249,35	316,93	374,17	422,11	494,25	541,74	605,81	C9H17O4
IpchqBqE	-198,92	581,28	249,35	316,93	374,17	422,11	494,25	541,74	605,81	C9H17O4
DpchqCqE	-196,66	583,22	249,13	316,25	372,83	420,15	491,71	539,37	603,57	C9H17O4
FpchqCqE	-200,01	581,28	249,3	317,01	374,22	422,09	494,22	541,81	605,72	C9H17O4
GpchqCqE	-196,66	581,28	249,3	317,01	374,22	422,09	494,22	541,81	605,72	C9H17O4
HpchqCqE	-196,66	581,28	249,3	317,01	374,22	422,09	494,22	541,81	605,72	C9H17O4
IpchqCqE	-196,66	581,28	249,3	317,01	374,22	422,09	494,22	541,81	605,72	C9H17O4
DpchqCqF	-215,95	575,99	243,45	313,03	371,79	421,15	496,75	548,9	619,47	C9H17O4
EpchqCqF	-206,96	581,63	238,63	308,65	367,96	417,9	494,6	547,54	618,69	C9H17O4
GpchqCqF	-206,96	581,63	238,63	308,65	367,96	417,9	494,6	547,54	618,69	C9H17O4
HpchqCqF	-206,96	581,63	238,63	308,65	367,96	417,9	494,6	547,54	618,69	C9H17O4
IpchqCqF	-206,96	581,63	238,63	308,65	367,96	417,9	494,6	547,54	618,69	C9H17O4
ApchqDqF	-206,04	569,5	243,68	314,22	373,53	423,13	498,66	550,48	620,58	C9H17O4
BpchqDqF	-217,12	577,16	240,34	310,21	369,33	419,07	495,38	548,05	619,01	C9H17O4
CpchqDqF	-217,12	577,16	240,34	310,21	369,33	419,07	495,38	548,05	619,01	C9H17O4
GpchqDqF	-217,12	577,16	240,34	310,21	369,33	419,07	495,38	548,05	619,01	C9H17O4
HpchqDqF	-217,12	577,16	240,34	310,21	369,33	419,07	495,38	548,05	619,01	C9H17O4
BpchqEqG	-206,96	581,63	238,63	308,65	367,96	417,9	494,6	547,54	618,69	C9H17O4
CpchqEqG	-206,96	581,63	238,63	308,65	367,96	417,9	494,6	547,54	618,69	C9H17O4
DpchqEqG	-215,95	575,99	243,45	313,03	371,79	421,15	496,75	548,9	619,47	C9H17O4
FpchqEqG	-206,96	581,63	238,63	308,65	367,96	417,9	494,6	547,54	618,69	C9H17O4
HpchqEqG	-206,96	581,63	238,63	308,65	367,96	417,9	494,6	547,54	618,69	C9H17O4
IpchqEqG	-206,96	581,63	238,63	308,65	367,96	417,9	494,6	547,54	618,69	C9H17O4
BpchqEqH	-13,01	594,44	231,06	298,78	356,13	404,41	478,54	529,8	600,57	C9H17O4
CpchqEqH	-13,01	594,44	231,06	298,78	356,13	404,41	478,54	529,8	600,57	C9H17O4
DpchqEqH	-215,95	575,99	243,45	313,03	371,79	421,15	496,75	548,9	619,47	C9H17O4
FpchqEqH	-13,01	594,44	231,06	298,78	356,13	404,41	478,54	529,8	600,57	C9H17O4
GpchqEqH	-13,01	594,44	231,06	298,78	356,13	404,41	478,54	529,8	600,57	C9H17O4
IpchqEqH	-13,01	594,44	231,06	298,78	356,13	404,41	478,54	529,8	600,57	C9H17O4
BpchqEqI	-206,96	581,63	238,63	308,65	367,96	417,9	494,6	547,54	618,69	C9H17O4
CpchqEqI	-206,96	581,63	238,63	308,65	367,96	417,9	494,6	547,54	618,69	C9H17O4
GpchqEqI	-206,96	581,63	238,63	308,65	367,96	417,9	494,6	547,54	618,69	C9H17O4
CpchqFqH	-13,01	594,44	231,06	298,78	356,13	404,41	478,54	529,8	600,57	C9H17O4
DpchqFqH	-215,12	579,21	241,32	308,34	365,77	414,7	491,02	544,61	617,03	C9H17O4
EpchqFqH	-13,01	594,44	231,06	298,78	356,13	404,41	478,54	529,8	600,57	C9H17O4
Dc6e5oA	18,25	399,57	131,6	162,78	189,61	212,6	248,97	275,32	314,04	C6H9O
Fc9oAoG	-246	570	226,1	275,48	317,71	353,75	410,59	451,92	513,81	C9H15O2
Fc9oAoH	-227,42	592,68	215,43	262,81	304,48	340,92	399,98	443,61	506,99	C9H15O2

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Annexe 4: Données thermodynamiques des espèces présentes dans le mécanisme

MeDc8oCoIrH	-226,79	585,36	212,7	263,8	307,73	345,37	405,08	448,67	513,5	C9H15O2
MeDc8oBoIrH	-221,88	569,03	209,31	262,8	307,45	344,8	402,93	446,38	539,3	C9H15O2
MeEc8oAoFrI	-225,37	584,48	216,25	266,27	309,25	346,08	404,55	447,36	511,6	C9H15O2
EtDc7oEoIrA	-225,37	584,48	216,25	266,27	309,25	346,08	404,55	447,36	511,6	C9H15O2
Fc9oAoE	-246	570	226,07	275,44	317,7	353,76	410,61	451,86	512,99	C9H15O2
MeEc8oDoIrA	-224,24	583,73	213,79	264,04	307,45	344,83	404,4	448,03	512,64	C9H15O2
c9oyAoF	-268,59	579,54	221,18	268,88	310,23	345,97	403,24	445,52	508,67	C9H15O2
EtDc7oAoCrI	-220,43	586,24	207,6	260,64	306,04	344,77	405,72	449,7	514,2	C9H15O2
EtDc7oAoHrI	-251,77	567,95	218,22	270,34	314,77	352,54	411,74	454,39	517,51	C9H15O2
MeEc8oAoDrI	-225,37	584,48	216,25	266,27	309,25	346,08	404,55	447,36	511,6	C9H15O2
EtDc7oCoIrA	-225,37	584,48	216,25	266,27	309,25	346,08	404,55	447,36	511,6	C9H15O2
Ac9oBoF	-277,17	574,6	222,94	272,67	315,27	351,68	409,24	451,19	513,88	C9H15O2
Ac9oDoF	-245,83	592,89	213,1	263,26	306,47	343,6	402,85	446,58	512,57	C9H15O2
Fc9oAoD	-229,05	593,43	218,44	265,2	306,25	342,11	400,27	443,48	507,25	C9H15O2
MeEc8oCoIrA	-223,09	569,45	211,47	265,13	309,43	346,09	402,65	445,82	554,71	C9H15O2
MeEc8oAoCrI	-220,35	585,44	211,87	263,34	307,49	345,26	404,98	448,42	512,83	C9H15O2
EtDc7oBoIrA	-253,74	567,16	221,96	272,81	316,25	353,23	411,25	452,98	514,3	C9H15O2
Ac9oCoF	-250,77	591,13	221,36	268,72	309,72	345,14	402,04	444,37	508,67	C9H15O2
MeEc8oBoIrA	-251,77	567,95	218,22	270,34	314,77	352,54	411,74	454,39	517,51	C9H15O2
Fc9oAoC	-222,06	595,19	209,13	259,41	303,12	340,91	401,27	445,12	508,16	C9H15O2
c9oAoGqjF	-376,68	628,41	245,32	302,66	350,02	388,96	447,76	491,06	604,73	C9H15O4
Hc9oAoGqF	-355,36	638,73	252,01	307,71	353,69	391,53	448,88	491,63	604,73	C9H15O4
c9oAoGqFqjH	-472,98	709,81	276,41	339	390,06	431,33	491,6	534,13	652,29	C9H15O6
c9oAoGoFqH	-612,79	675,75	256,72	313,47	359,91	397,63	453,5	494,3	612,27	C9H4O5
c7oyAoBoG	-289,15	446,6	170,64	207,4	238,69	265,07	305,56	334,12	389,75	C7H9O3
c6oyAoF	-186,34	457,58	149,63	180,14	205,93	227,78	262,52	289,62	355,65	C6H9O2
c5oAqjE	-166,87	451,26	149,98	182,64	209,93	232,66	267,43	292,75	349,27	C5H9O3
Cc5oAqE	-118,75	479,36	156,92	187,68	212,57	232,94	264,36	288,29	343,41	C5H9O3
Bc5oAqE	-145,54	461,45	157	188,51	214,35	235,64	268,38	292,85	348,44	C5H9O3
c5oAqEqjC	-269,4	527,75	184,45	220,87	250,46	274,34	309,22	333,67	398,97	C5H9O5
c5oAqEqjB	-195,39	526,91	181,05	219,02	250	275,01	311,25	335,85	396,71	C5H9O5
c5oAoEqC	-415,9	488,73	165,34	196,22	221,67	242,5	273,66	296,75	363,57	C5H8O4
c5oAoEqB	-409,67	493,65	161,87	194,44	221,25	243,15	275,65	298,99	361,81	C5H8O4
Ac7oBoG	-191,34	483,22	172,7	211,56	244,23	271,72	314,82	347,57	420,72	C7H11O2
c7oBoGqjA	-317,6	553,53	202,06	243,45	277,9	306,52	350,45	383,5	468,34	C7H11O4
Cc7oBoGqA	-296,27	562,15	209,25	249,4	282,37	309,55	351,44	383,61	467,58	C7H11O4
Dc7oBoGqA	-269,48	581,62	208,98	248,5	280,55	306,79	347,37	379,07	462,63	C7H11O4
c7oBoGqAqjC	-413,9	634,91	233,09	279,87	317,99	348,86	394,26	426,65	515,67	C7H11O6
c7oBoGqAqjD	-420,13	635,75	236,53	281,68	318,43	348,2	392,25	424,44	517,82	C7H11O6
c7oAoBoGqC	-533,16	541,03	209,01	252,59	288,73	318,36	361,93	391,2	453,39	C7H10O5
c7oAoBoGqD	-539,39	541,87	212,46	254,39	289,16	317,7	359,92	388,98	455,45	C7H10O5

EtDc7oEoIqjA	-364,09	628,91	236,32	294,38	342,48	382,16	442,32	486,7	600,86	C9H15O4
CEtDc7oEoIqA	-315,97	657,02	243,26	299,41	345,12	382,45	439,25	482,23	595,18	C9H15O4
DEtDc7oEoIqA	-355,74	633,83	243,31	299,6	345,58	383,25	440,79	484,39	598,09	C9H15O4
CEtDc7oEoIqAqj	-466,63	711,14	270,83	332,55	382,98	423,87	484,14	527,57	650,51	C9H15O6
DEtDc7oEoIqaqj	-465,38	696,29	282,19	339,57	388,16	429,21	493,03	538,62	604,91	C9H15O6
EtDc7oAoEoIqC	-613,12	672,07	251,66	307,98	354,24	392	448,54	490,72	613,89	C9H4O5
DEtDc7oAoEoIq	-460,95	649,88	254,41	304,83	347,62	383,89	440,73	482,07	545,88	C9H4O5
Cc6oAoD	-196,96	438,41	152,84	184,82	210,9	232,37	265,93	293,15	372,26	C6H9O2
MeCc6oAoDo	-470,78	515,14	175,87	213,73	246,18	273,93	317,82	349,79	397,05	C7H0O3
MeCc6oyAoDo	-316,38	519,83	172,31	207,71	238	263,85	304,61	334,16	377,56	C7H9O3
MeCc6oAoDoy	-316,38	519,83	172,31	207,71	238	263,85	304,61	334,16	377,56	C7H9O3
c6oAoCoF	-457,21	484,71	147,68	181,31	208,98	231,97	268,05	295,84	342,45	C6H8O3
c6oyAoCoF	-309,49	490,88	143,58	174,34	199,25	219,81	252,42	277,93	317,38	C6H7O3
c6oAoCoyF	-309,49	490,88	143,58	174,34	199,25	219,81	252,42	277,93	317,38	C6H7O3
Ec5oAoD	-149,95	404,86	126,94	153,34	175,25	193,53	222,15	244,34	298	C5H7O2
Ec5oAoC	-149,02	425,06	119,14	147,44	170,23	188,78	217,49	240,59	307,35	C5H7O2
MeBc5oAoCrF	-164,9	467,1	143,37	176,14	204,23	228,23	266,14	293,69	334,38	C6H9O2
c9oAoCqjF	-391,66	636,54	237,97	296,35	344,71	384,61	445,17	490,02	606,41	C9H15O4
Dc9oAoCqF	-370,34	645,48	245,16	302,32	349,19	387,65	446,16	490,14	605,7	C9H15O4
c9oAoCqFqjD	-487,97	712,15	269,03	332,74	384,78	426,97	489	533,14	653,65	C9H15O6
c9oAoCoFqD	-646,72	680,25	246,77	304,6	352,11	390,93	449,15	492,94	622,14	C9H4O5
c6oAoC	-373,92	455,45	142,31	178,71	209,48	235,4	276,02	307,45	387,31	C6H0O2
c6oyAoC	-226,2	461,59	138,23	171,71	199,74	223,27	260,36	289,6	367,66	C6H9O2
MeEc8oAoCqjI	-374,97	633,24	235,4	293,16	341,46	381,7	443,37	488,52	592,48	C9H15O4
DMeEc8oAoCqI	-353,65	642,24	242,59	299,11	345,93	384,74	444,35	488,63	591,71	C9H15O4
GMeEc8oAoCqI	-326,86	661,35	241,91	297,33	343,34	381,54	440,44	484,54	587,54	C9H15O4
MeEc8oAoCqIqj	-471,28	714,62	266,48	329,51	381,51	424,07	487,21	531,61	639,79	C9H15O6
MeEc8oAoCqIqj	-479,77	715,48	269,95	331,28	381,92	423,42	485,22	529,36	641,77	C9H15O6
DMeEc8oAoCoIq	-615,65	678,51	237,47	298,01	348,02	388,98	450	494,08	611,78	C9H4O5
MeEc8oAoCo	-624,14	679,36	240,9	299,82	348,46	388,33	447,98	491,86	613,58	C9H4O5
MeBc5oAoFIqG	-337,13	450,83	146,4	182,19	212,93	239,23	280,77	310,76	354,42	C6H0O2
MeBc5oyAoF	-182,73	455,51	142,99	176,37	205,07	229,63	268,34	296,09	335,61	C6H9O2
c9oDoFqjA	-403,91	637,94	234,88	292,8	340,79	380,43	440,93	486,7	611,76	C9H15O4
Cc9oDoFqA	-382,59	646,86	242,03	298,81	345,3	383,45	441,89	486,86	611,05	C9H15O4
c9oDoFqAqjC	-500,22	719,32	265,94	329,18	380,86	422,8	484,75	529,8	659,22	C9H15O6
c9oAoDoFqC	-646,72	680,25	246,77	304,6	352,11	390,93	449,15	492,94	622,14	C9H4O5
EtDc7oArI	-110,82	540,49	216,53	269,88	315,07	353,41	413,97	458,96	540,65	C9H7O
EtDc7oAqjI	-251,82	599,96	241,42	299,08	348,09	389,5	453,67	499,78	587,1	C9H17O3
DEtDc7oAqI	-216,67	624,24	248,12	303,45	349,4	387,83	448,04	492,97	579,12	C9H17O3
EtDc7oAqIqjD	-371,3	674,76	276,97	338,74	390,05	432,37	495,95	541,25	648,44	C9H7O5
EtDc7oAoIqD	-517,8	635,71	257,81	314,15	361,3	400,52	460,35	504,38	613,66	C9H16O4

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

c7oAoD	-385,86	487,32	175,98	215,93	249,7	278,18	322,94	357,86	449,52	C7H2O2
c7oyAoD	-238,14	493,48	171,87	208,95	239,99	266,06	307,26	340,04	429,69	C7H1O2
EtDc7oIrA	-110,82	540,49	216,54	269,87	315,07	353,41	413,97	458,95	540,85	C9H7O
EtDc7oIqjA	-251,82	599,96	241,39	299,13	348,12	389,49	453,64	499,82	587,28	C9H17O3
CEtDc7oIqA	-203,7	628,06	248,33	304,14	350,75	389,78	450,57	495,35	581,35	C9H17O3
DEtDc7oIqA	-216,67	624,24	248,14	303,41	349,38	387,84	448,06	492,93	579,31	C9H17O3
EtDc7oIqAqjC	-354,35	682,18	275,9	337,31	388,62	431,19	495,46	540,71	636,81	C9H17O5
EtDc7oIqAqjD	-371,3	674,76	276,99	338,71	390,03	432,38	495,96	541,23	648,32	C9H17O5
EtDc7oAoIqC	-500,85	643,12	256,73	312,71	359,87	399,34	459,86	503,82	602,81	C9H16O4
MeEc8oArI	-116,01	540,49	216,53	269,88	315,07	353,41	413,97	458,96	540,65	C9H17O
MeEc8oAqjI	-251,82	599,96	241,42	299,08	348,09	389,5	453,67	499,78	587,1	C9H17O3
DMeEc8oAqI	-203,7	628,06	248,31	304,17	350,77	389,77	450,56	495,38	581,18	C9H17O3
FMeEc8oAqI	-203,7	628,06	248,3	304,18	350,78	389,77	450,55	495,38	581,52	C9H17O3
MeEc8oAqIqjD	-354,35	682,18	275,89	337,32	388,63	431,19	495,46	540,72	636,81	C9H7O5
MeEc8oAqIqjF	-354,35	682,19	275,9	337,31	388,62	431,19	495,46	540,71	636,81	C9H7O5
MeEc8oAoIqD	-498,72	646,08	246,85	305,85	355,16	396,1	458,23	503,21	610,6	C9H16O4
MeEc8oAoIqF	-498,72	646,08	246,85	305,85	355,16	396,1	458,23	503,21	610,6	C9H16O4
MeCc6oAoG	-354,79	485,58	166,63	209,39	245,65	276,22	323,76	359,04	438,43	C7H12O2
MeCc6oyAoG	-207,07	491,74	162,55	202,39	235,92	264,1	308,1	341,19	417,91	C7H11O2
MeCc6oAoyG	-210	491,74	162,55	202,39	235,92	264,1	308,1	341,19	417,91	C7H11O2
Bc6oAoF	-165,85	443,03	153,3	185,1	211,32	233,13	267,47	294,38	359,91	C6H9O2
MeEc8oIrA	-108,69	543,45	206,63	263,04	310,38	350,17	412,32	458,35	549,4	C9H7O
Fc9oA	-117,86	549,12	216,4	269,15	313,5	351	410,56	455,96	546,34	C9H7O
MeEc8oIqjA	-249,69	602,91	231,54	292,21	343,38	386,27	452,03	499,15	595,63	C9H17O3
CMeEc8oIqA	-201,57	631,02	238,45	297,28	346,04	386,55	448,94	494,73	589,81	C9H17O3
DMeEc8oIqA	-201,57	631,02	238,45	297,28	346,04	386,55	448,94	494,73	589,81	C9H17O3
MeEc8oIqAqjC	-352,22	679,38	266,02	330,42	383,9	427,97	493,83	540,06	645,54	C9H7O5
MeEc8oIqAqjD	-352,22	685,14	266,02	330,42	383,9	427,97	493,83	540,06	645,54	C9H7O5
MeEc8oAoIqC	-498,72	646,08	246,85	305,84	355,16	396,1	458,22	503,2	610,86	C9H16O4
c9oAqjF	-268,51	603,25	243,98	302,31	351,36	392,41	455,45	501,31	602,02	C9H17O3
Cc9oAqF	-220,39	631,35	250,88	307,37	354,03	392,69	452,36	496,88	596,22	C9H17O3
Dc9oAqF	-220,39	631,35	250,88	307,37	354,03	392,69	452,36	496,88	596,22	C9H17O3
Hc9oAqF	-220,39	631,36	250,48	306,49	353,25	392,25	452,52	497,33	597,05	C9H17O3
c9oAqFqjC	-371,04	679,72	278,44	340,53	391,89	434,1	497,24	542,23	651,59	C9H17O5
c9oAqFqjD	-371,04	679,71	278,44	340,54	391,9	434,1	497,24	542,23	651,59	C9H17O5
c9oAqFqjH	-373,3	685,49	278,45	340,52	391,89	434,1	497,25	542,22	651,59	C9H17O5
c9oAoFqC	-529,79	647,82	256,18	312,39	359,22	398,06	457,39	502,04	622,03	C9H16O4
c9oAoFqD	-529,79	647,82	256,16	312,42	359,24	398,05	457,38	502,06	622,15	C9H16O4
c9oAoFqH	-532,05	647,82	256,16	312,42	359,24	398,05	457,38	502,06	622,15	C9H16O4
MeBc5oArF	-51,79	425,92	138,03	175,67	206,89	232,89	273,33	303,48	365,25	C6H11O
pchoBqjE	-258,78	506,46	211,49	274,23	327,92	373,4	443,15	490,1	548,8	C9H15O3

CpchoBqE	-237,46	514,47	218,63	280,2	332,4	376,42	444,11	490,23	547,98	C9H15O3
pchoBqEqjC	-355,09	582,09	242,5	310,67	368,02	415,75	486,93	533,26	596,56	C9H15O5
pchoBoEqC	-509,65	556,82	221,06	282,73	334,4	377,54	443,39	489,29	554,84	C9H4O4
pchoEqjB	-249,41	503,5	227,74	287,62	336,78	376,92	436,71	479,76	591,78	C9H15O3
DpchoEqB	-228,07	523,3	232,6	289,79	336,78	375,26	433,07	475,37	587	C9H15O3
pchoEqBqjD	-354,75	590,63	250,46	314,96	368,79	413,58	481,69	529,08	597,31	C9H15O5
pchoBoEqD	-514,26	547,11	227,15	286,6	336,84	379,12	444,36	490,25	555,46	C9H4O4
c7e6oA	-142,56	454,93	161,07	199,58	232,79	261,34	306,8	340,15	390,2	C7H2O
Ec7e6oA	-2,38	438,99	154,61	191,97	224,11	251,65	295,27	327	374,04	C7H1O
c5e4oB	-127,33	381,62	107,87	135,78	159,81	180,45	213,26	237,27	272,96	C5H8O
Cc5e4oB	12,85	365,67	101,42	128,15	151,06	170,64	201,6	224,12	257,77	C5H7O
c7e6oAoE	-270,94	469,11	166,61	202,7	233,46	259,62	300,81	330,81	376,25	C7H10O2
c7e6oyAoE	-116,53	473,8	163,13	196,7	225,26	249,52	287,6	315,22	356,77	C7H9O2
Dc7oA	-74,77	489,7	166,3	204,64	238,5	268,2	316,52	352,31	404,48	C7H13O
c7e3oA	-149	463,09	154,38	194,56	229,13	258,77	305,83	340,21	391,6	C7H2O
c7e4oyA	0,25	466,85	154,92	191,28	222,61	249,51	292,24	323,46	370,02	C7H1O
Cc5e4oA	38,87	360,15	108,72	133,65	155,12	173,53	202,7	223,85	254,83	C5H7O
c6e5oAo4	-250,31	429,7	143,9	173,62	198,91	220,43	254,39	279,33	317,81	C6H8O2
c6e5oyAo4	-95,9	434,38	140,27	167,57	190,75	210,42	241,27	263,68	297,6	C6H7O2
c5e4oAoC	-224,74	392,04	112,17	138,81	161,28	180,17	209,27	229,75	259	C5H6O2
c5e4oyAoC	-70,34	396,72	108,63	132,78	153,08	170,06	196,04	214,12	239,52	C5H5O2
c6alCco	-201,94	494,05	170,91	208,47	241,09	269,22	313,68	345,16	386,5	C7H11O2
MeCc6oBoGrA	-211,94	489,99	167,74	209,22	244,32	273,94	319,85	352,41	399,75	C7H11O2
c7e6oAoD	-250,43	480,75	162,54	198,86	229,93	256,44	298,25	328,6	373,67	C7H10O2
c7e6oyAoD	-96,03	485,43	159,1	192,88	221,74	246,33	285,02	313,04	354,49	C7H9O2
c6e5oC	-149,59	421,79	133,73	167,28	196,03	220,63	259,68	288,44	332,31	C6H0O
Ac6e5oC	55,44	432,71	130,53	161,5	187,99	210,61	246,43	272,76	312,87	C6H9O
c9e5oAoD	-323,78	555,19	210,25	258,84	300,41	335,92	392,07	433,18	495,27	C9H14O2
c9e5oyAoD	-169,38	559,87	206,74	252,84	292,22	325,81	378,85	417,56	475,83	C9H13O2
c9e6oAoD	-303,28	566,82	205,77	254,87	296,93	332,86	389,55	430,71	491,55	C9H14O2
c9e6oyAoD	-148,88	571,51	202,28	248,87	288,74	322,75	376,33	415,09	472,07	C9H13O2
Ac8e5oC	2,6	518,78	173,89	217,58	255,01	287,02	337,78	375,04	431,62	C8H13O2
c6e5oAoC	-222,82	443,09	131,1	164,23	192,32	216,07	252,97	279,24	317,33	C6H8O2
c6e5oyAoC	-68,41	447,77	127,58	158,21	184,12	205,96	239,75	263,63	297,9	C6H7O2
Gic7al	-73,06	479,95	168,5	208,4	242,93	272,72	320,37	355,45	408,08	C7H13O
Ac6oC	-75,86	447,98	146,37	179,04	207,46	232,12	271,99	301,83	347,41	C6H1O
Gpc7al	-71,09	480,75	164,73	205,89	241,46	272,1	320,96	356,74	409,92	C7H13O
Bc5oA	-22,43	403,21	123,58	150,31	173,67	194,01	226,94	251,53	288,89	C5H9O
c7e6oAoC	-248,59	481,58	158,47	196,17	228,34	255,72	298,75	329,87	375,95	C7H0O2
c7e6oyAoC	-94,19	486,27	155,11	190,21	220,13	245,57	285,49	314,29	356,72	C7H9O2
Cc6oA	-54,14	450,28	143,23	175,67	204,5	229,95	271,61	302,6	347,31	C6H1O

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Ipc9oAoB	-199,55	574,18	215,92	267,52	311,62	349,2	408,27	450,89	513,92	C9H15O2
c2h4cohco	-87,03	379,19	102,33	121,95	138,8	153,2	175,88	192,15	215,25	C4H5O2
Bc5oAoC	-185,02	407,86	119,04	147,51	170,61	189,54	219	242,72	310,14	C5H7O2
Ac7oD	-96,49	487,4	169,26	208,18	241,97	271,22	318,34	353,43	406,82	C7H13O
Ac7oBoD	-228,92	497,53	168,74	208,89	243,05	272,05	317,48	350,24	398,74	C7H1O2
Ec7e6oAoB	-87,62	454,38	156,19	192,78	223,8	249,99	290,57	319,28	360,75	C7H9O2
chxoAoC	-327,34	395,05	120,8	155,37	185,18	210,76	251,23	280,37	322,33	C6H8O2
BchxoAoC	-225,28	378,1	112	147,29	177,32	202,74	242,07	269,53	307,22	C6H7O2
DchxoAoC	-148,29	390,2	122,25	155,96	184,46	208,45	245,37	271,16	307,44	C6H7O2
c6oAoBoyF	-259,14	471,33	154,38	182,73	207,07	227,87	260,69	284,37	318,7	C6H7O3
Ec5oAoB	-107,66	418,61	125,24	151,12	173,33	192,31	222,22	243,81	275,33	C5H7O2
Fc6e1oCoE	-97,49	431,2	133,2	165,81	192,77	215	248,47	271,61	305,65	C6H7O2
FpchqDqE	-217,12	577,16	240,34	310,21	369,33	419,07	495,38	548,05	619,01	C9H17O4
pche5qD	-189,67	497,32	210,54	272,71	324,69	368,01	434,04	480,12	547,24	C9H16O2
pche5ojD	-37,41	460,66	185,65	244,26	293,33	334,26	396,63	440,01	503,07	C9H15O
c9e1qAoF	-295,66	608,33	241,58	297,23	344,06	383,38	444,07	487,19	551,42	C9H16O3
c9e1ojAoF	-242,69	566,74	213,79	265,6	309,62	346,94	405,36	447,61	511,44	C9H15O2
Dc5oBohE	-191,01	426,18	132,66	162,51	188,29	210,52	246,19	272,86	315,34	C5H9O2
c5oBqjDohE	-360,31	499,95	163,85	196,22	223,56	246,74	283,47	311,25	358,49	C5H9O4
c4oAoC	-311,23	378,77	98,32	121,15	141,03	158,24	185,77	205,83	234,39	C4H6O2
c4oyAoC	-156,83	383,46	94,75	115,11	132,82	148,14	172,56	190,23	214,96	C4H5O2
Fc9e1qDqF	-135,82	672,73	274,96	333,26	382,47	423,89	488,02	533,68	600,73	C9H17O4
Iic9e1qDqI	-137,08	665,36	273,63	330,95	379,62	420,84	485,21	531,47	599,65	C9H17O4
c9e1oFqD	-319,56	605,86	243,22	298,12	344,62	383,97	445,5	490,11	557,52	C9H16O3
c9e1oFojD	-167,29	569,21	218,05	269,59	313,27	350,24	408,09	450,08	514,3	C9H15O2
EtDc7e1oIqD	-306,29	593,94	244,09	299,83	346,92	386,61	448,29	492,54	558,63	C9H16O3
EtDc7e1oIojD	-154,02	557,28	219,66	271,37	315,43	352,81	411,03	452,27	509,89	C9H15O2
c7e1oD	-172,27	461,21	156,73	196,44	230,51	259,67	306	340,08	391,95	C7H12O
Cc7e1oD	-72,26	444,26	147,76	188,37	222,72	251,71	296,81	329,21	377,96	C7H11O
Ipche4e6	134,84	414,98	180,3	230,04	271,62	305,96	356,64	389,63	444,47	C9H13
Dpche5e7	146,52	413,19	191,86	239,35	279,3	312,67	363,27	397,67	452,61	C9H13
Ipche5e7	146,52	411,25	192,06	240,06	280,66	314,62	365,8	400,06	454,71	C9H13
Ic9oAoD	-223,05	574,46	221,39	272,02	313,96	348,85	403,38	445,88	554,05	C9H15O2
Gc7oAoD	-181,66	496,13	175,66	213,78	244,96	270,66	310,72	342,64	431,02	C7H11O2
Ic9oBoD	-261,7	578,05	207,86	261,23	305,77	343,07	401,52	446,39	551,22	C9H15O2
Gc7oBoD	-220,31	499,72	162,15	202,96	236,76	264,9	308,88	343,12	428,16	C7H11O2
Ac5oBoD	-188,6	408,45	113,37	142,58	167,09	187,74	220,27	244,89	294,9	C5H7O2
MeDc6oBoGrF	-180,49	490,69	163,57	204,56	238,46	266,62	310,27	343,13	416,73	C7H1O2
Bc5oAoD	-175,06	400,04	127,67	153,28	174,37	191,95	219,85	242,07	296,02	C5H7O2
MeEc8e1oIqG	-292,38	607,09	230,67	288,84	337,73	378,49	440,33	484,14	578,45	C9H16O3
MeEc8e1oIojG	-135,21	554,18	204,27	260,56	307,73	347,03	406,9	449,72	540,42	C9H15O2

MeEc6e1oGrF	55,75	455,37	150,17	190,19	223,45	251,11	293,67	324,72	386,5	C7H1O
Fc9e1qEqH	-116,59	668,82	269,13	328,64	377,16	416,75	476,23	518,79	613,03	C9H17O4
c9e1e5qH	-95,61	568,7	222,98	275,93	322,12	361,89	423,43	463,14	484,05	C9H16O2
c9e1e5ojH	61,56	515,78	196,58	247,65	292,13	330,43	389,96	428,69	447,31	C9H15O
c7e1e6qC	-34,82	495,34	179,7	221,46	256,9	286,71	332,04	362,8	410,74	C7H2O2
c7e1e6ojC	22,35	442,36	153,3	193,17	226,91	255,25	298,58	328,35	374,09	C7H1O
Cc7h11-16	194,25	407,18	140,76	176,22	206,96	233,46	275,52	305,83	352,61	C7H11
c9e5oAqH	-298,34	607,74	240,64	296,19	343,31	383,19	445,48	490,37	557,38	C9H16O3
c9e5oAojH	-146,07	571,09	215,72	267,77	311,97	349,43	408,03	450,37	514,26	C9H15O2
HpchqBqE	-198,92	581,28	249,35	316,93	374,17	422,11	494,25	541,74	605,81	C9H17O4
pche4qB	-183,44	504,22	207,36	270,03	322,41	366,09	432,87	479,86	549,45	C9H16O2
pche4ojB	-31,17	467,57	184,02	241,75	290,44	331,38	394,6	439,41	505,48	C9H15O
mche1qC	-126,28	416,14	165,11	214,77	256,03	290,22	342,06	378,24	431,96	C7H12O2
mche1ojC	25,99	379,48	140,18	187,7	227,53	260,71	310,85	344,79	390,89	C7H11O
MeBc4e1oErD	70,72	373,37	115,18	141,49	163,25	181,22	208,38	227,4	256,64	C5H7O
ch2ccho	153,06	289,56	69,9	82,25	92,49	100,96	113,86	123,03	137,45	C3H3O
pche5qB	-177,75	499,2	204,78	268,46	321,54	365,68	432,9	479,98	549,57	C9H16O2
pche5ojB	-25,48	462,54	181,92	240,17	289,28	330,56	394,24	439,29	505,49	C9H15O
Amche3	171,06	354,83	138,72	182,36	218,61	248,69	294,32	325,72	373,7	C7H11
Gc7e1e3	239,19	408,24	146,48	184,26	215,52	241,35	280,42	307,52	352,07	C7H11
Fc9e1qAqH	-96,85	661,17	270,81	330,63	379,57	419,62	479,98	523,4	620,36	C9H17O4
c7e1e6qA	-20,35	487,16	180,79	222,04	257,79	288,37	335,33	365,85	389,91	C7H12O2
Bc7e6oA	22,05	443,07	160	197,19	228,38	254,62	295,91	326,92	388,6	C7H11O
Ic9oCoD	-228,99	573,97	219,97	272,43	315,54	351,06	405,6	447,19	554,71	C9H15O2
Gc7oCoD	-187,6	495,64	174,23	214,2	246,55	272,87	312,93	343,95	432,01	C7H1O2
Ac5oBoC	-155,89	404,37	125,51	153,74	176,84	195,74	224,36	245,65	298,89	C5H7O2
MeDc6oCoGrF	-185,53	506,52	166,48	205,36	238,73	267,28	312,45	345,35	394,1	C7H11O2
MeEc8e1oIqF	-290,12	607,09	230,67	288,84	337,73	378,49	440,33	484,14	578,45	C9H16O3
MeEc8e1oIojF	-132,95	554,16	204,26	260,57	307,73	347,03	406,9	449,73	540,42	C9H15O2
Bc6e5oA	51,53	403,77	137,1	168,08	193,89	215,52	249,57	275,32	327,13	C6H9O
chxe1qC	-103,23	381,03	138,19	181,77	218	248,02	293,36	324,56	368,99	C6H0O2
chxe1ojC	49,04	344,38	113,13	154,03	188,1	216,31	258,67	287,24	326,5	C6H9O
chchhco	162,27	289,73	73,04	86,19	96,7	105,06	116,97	124,7	136,16	C3H3O
c9e5oAqG	-296,69	608,24	239,4	294,7	341,44	380,68	440,93	484,25	575,24	C9H16O3
c9e5oAojG	-139,52	555,31	213,02	266,39	311,42	349,23	407,52	449,8	537,47	C9H15O2
c7e2oAoG	-246,45	480,25	155,93	194,91	229,27	259,41	308,67	345,99	407,22	C7H10O2
c7e2oyAoG	-100	470,41	145,5	182,12	215,31	244,92	293,58	330,05	390,56	C7H9O2
c7e2oAoyG	-98,73	486,41	151,88	187,88	219,52	247,3	293,03	328,11	386,75	C7H9O2
c7e1oAoG	-244,07	471,58	171,91	208,8	240,09	266,55	307,72	337,08	380,03	C7H10O2
c7e1oAoyG	-89,67	476,27	168,62	203,14	232,29	256,84	294,78	321,62	360,64	C7H9O2
Fc6e1oA	61,8	423,55	140,01	171,38	197,7	219,75	253,67	277,77	314,26	C6H9O

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Annexe 4: Données thermodynamiques des espèces présentes dans le mécanisme

Dc4e1oA	103,06	344,71	93,56	112,59	128,29	141,22	160,7	174,31	195,22	C4H5O
Fc9e1qEqG	-115,53	666,28	266,37	327,27	378,49	421,44	487,46	533,9	601	C9H17O4
c9e1e6qE	-87,66	570	222,64	279,52	327,24	367,18	428,66	472,35	537,78	C9H16O2
c9e1e6ojE	64,61	533,34	195,81	251,35	297,47	335,63	393,24	433,04	491,86	C9H15O
c9e1e5qG	-87,66	570	222,64	279,52	327,24	367,18	428,66	472,35	537,78	C9H16O2
c9e1e5oj	4,61	533,34	195,81	251,35	297,47	335,63	393,24	433,04	491,86	C9H15O
c7e2e6oA	-52,97	430,7	148,87	186,96	218,81	245,38	286	314,61	357,25	C7H10O
c7e2e6oyA	76,32	424,88	148,28	183,15	212,09	236,07	272,53	298,3	338,12	C7H9O
c5e2oA	-137,87	368,06	114,52	143,42	167,69	188,02	219,35	241,65	275,48	C5H8O
c5e2oyA	-8,58	362,24	113,96	139,61	160,96	178,72	205,91	225,31	255,64	C5H7O
EtDc7e1qEqHrI	-113,81	656,53	269,25	332,05	384,22	427,41	492,71	537,94	603,51	C9H17O4
EtDc7e1e8qE	-88,71	562,68	223,59	280,84	328,81	368,91	430,42	473,9	538,51	C9H16O2
EtDc7e1e8ojE	63,56	526,02	199,74	252,64	297,1	334,39	391,91	432,89	494,92	C9H15O
MeCc6oAoDr	-184,11	505,64	169,99	207,81	240,28	268,07	312	343,91	390,96	C7H1O2
pche3qF	-183,44	504,22	207,36	270,03	322,41	366,09	432,87	479,86	549,45	C9H16O2
pche3ojF	-31,17	467,57	183,47	241,62	290,53	331,54	394,65	439,26	505,56	C9H15O
MeEc8e5oArI	-59,08	531,63	204,6	254,89	297,68	334,02	391,02	432,33	494,75	C9H15O
EtDc7e4oIrA	0,76	555,77	198,41	248,63	291,63	328,36	386,39	428,66	492,09	C9H15O
MeEc7e6e8oA	-66,15	463,3	179,57	222,2	257,8	287,52	333,27	366,13	417,52	C8H12O
MeEc7e6e8oyA	88,25	467,98	176,08	216,2	249,61	277,42	320,04	350,51	398,12	C8H11O
MeCc6e3oAr	-12,68	453,72	154,57	193,81	227,02	255,08	298,76	330,16	377,28	C7H11O
MeCc6e1e7rF	239,01	413,67	148,37	185,08	215,78	241,42	280,9	309,17	353,39	C7H10
MeCc5e4e5oA	-19,75	385,38	129,32	161,14	187,31	208,81	241,19	263,95	299,58	C6H8O
MeCc5e4e5oyA	134,65	390,07	125,83	155,14	179,12	198,7	227,96	248,33	280,17	C6H7O
MeEc8e8oAqF	-296,46	601,43	244,64	300,76	348,02	387,74	449,24	493,26	559,22	C9H16O3
MeEc8e8oAojF	-144,19	564,77	219,72	272,33	316,66	353,95	411,78	453,29	516,29	C9H15O2
Ec6e5oA	116,16	423,09	136,57	165,27	190,21	211,81	246,49	272,08	310,25	C6H9O
MeBc6e7oAoF	-255,79	460,83	170,27	208,05	239,7	266,12	306,57	335,02	377,36	C7H0O2
MeBc6e7oAoyF	-101,39	465,52	166,83	202,06	231,47	255,96	293,27	319,37	358,08	C7H9O2
MeBc6e7oyAoF	-126,49	455,01	169,55	204,19	232,99	256,88	293,19	318,66	357,22	C7H9O2
MeBc5e6oArE	50,09	412,79	137,89	170,52	197,7	220,29	254,71	278,93	315,7	C6H9O
ic3h4hco	36,66	310,73	94,51	115,83	133,04	146,88	167	180,5	200,9	C4H5O
EtDc7e1oIqE	-296,12	598,41	242,26	298,26	345,6	385,53	447,58	492,05	558,27	C9H16O3
EtDc7e1oIojE	-143,86	561,76	217,2	269,78	314,25	351,78	410,15	452,02	514,98	C9H15O2
MeCc6e5oAo	-230,18	473,17	161,82	199,22	231,1	258,16	300,44	330,64	374,64	C7H0O2
MeCc6e5oyA	-75,78	477,86	158,32	193,22	222,91	248,06	287,21	315,01	355,09	C7H9O2
MeCc6e5oAoy	-75,78	477,86	158,32	193,22	222,91	248,06	287,21	315,01	355,09	C7H9O2
MeBc5e4oArF	75,7	425,14	130,05	161,88	189,08	212,23	248,59	274,8	313,56	C6H9O
Cc6e5oA	18,25	399,57	131,6	162,78	189,61	212,6	248,97	275,32	314,04	C6H9O
Dc7oAoC	-199,8	492,92	171,62	211,6	245,5	274,17	318,86	350,92	398,46	C7H1O2
c3h7chco	-122,6	373,21	119,35	147,38	170,81	190,37	220,37	241,68	274,23	C5H8O

EtDc7e9oAqC	-295,08	598,41	241,85	298,25	345,79	385,79	447,76	492,08	558,28	C9H16O3
EtDc7e9oAojC	-142,81	561,76	217,74	270,05	314,33	351,75	410,09	452,14	515,76	C9H15O2
c9e5oAqC	-298,34	607,74	240,64	296,19	343,31	383,19	445,48	490,37	557,38	C9H16O3
c9e5oAojC	-146,07	571,09	215,72	267,77	311,97	349,43	408,03	450,37	514,26	C9H15O2
MeCc6e1oG	-149,76	452,08	157,83	197,31	231,39	260,72	307,4	341,54	392,26	C7H12O
MeCc6e1oy	0,65	456,77	154,36	191,32	223,2	250,6	294,17	325,93	372,87	C7H11O
c7e3oyA	5,4	467,77	150,9	188,57	220,93	248,66	292,59	324,6	372,21	C7H11O
AmchqBqD	-164,78	490,66	197,46	255,82	304,6	345,1	406,05	447,08	500,86	C7H13O4
mche1qD	-130,59	418,15	164,74	213,85	254,84	288,95	340,86	377,09	430,04	C7H12O2
mche1ojD	21,68	381,49	140,12	185,55	223,51	255,13	303,34	337,05	387	C7H11O
MeEc6e5oAr	-6,23	445,56	161,21	198,8	230,67	257,64	299,72	330,06	375,86	C7H11O
MeCc6e7oArF	53,6	469,7	154,96	192,54	224,64	252,01	295,11	326,42	373,36	C7H11O
MeCc4e3oArE	40,17	367,64	113,39	139,75	161,96	180,53	208,57	227,26	250,25	C5H7O
c9e1oFqD	-319,56	605,86	243,22	298,12	344,62	383,97	445,5	490,11	557,52	C9H16O3
c9e1oFojD	-167,29	569,21	218,05	269,59	313,27	350,24	408,09	450,08	514,3	C9H15O2
pche6qD	-188,96	494,72	208,04	269,84	321,83	365,43	432,47	479,67	548,22	C9H16O2
pche6ojD	-36,69	458,07	183,33	241,49	290,48	331,61	394,99	439,76	505,49	C9H15O
Ac9e2oF	-88,75	528,83	199,1	248	290,23	326,59	384,61	427,26	491,15	C9H15O
Ac9e3oF	-18,03	558,2	196,91	246,76	289,49	326,07	384,09	426,68	491,27	C9H15O
Ac7e1oD	77,08	467,02	156,01	193,1	224,74	251,69	294,24	325,44	373,09	C7H11O
Ic9e3oA	14,77	552,84	197,27	247,18	290,09	326,87	385,23	427,84	491,51	C9H15O
Gc7e3oA	56,03	474,01	151,16	188,8	221,12	248,79	292,62	324,56	372,2	C7H1O
Ic9e4oA	9,63	551,92	201,22	249,89	291,78	327,74	384,89	426,75	489,62	C9H15O
MeDc8e9oArH	7,2	547,61	205,05	253,64	295,29	330,93	387,37	428,64	491,03	C9H15O
MeDc6e7oArF	48,46	468,78	158,96	195,25	226,3	252,83	294,74	325,31	371,47	C7H1O
Dc5e4oA	136,79	383,67	113,67	136,12	155,71	172,73	200,2	220,56	250,95	C5H7O
EtDc7e9oAr	12,89	542,59	203	252,1	294,16	330,12	386,99	428,49	491,05	C9H15O
Gc7e4oA	50,88	473,09	155,17	191,51	222,79	249,63	292,26	323,41	369,96	C7H1O
Ec5e4oA	145,99	381,91	114,37	137,89	158,04	175,27	202,51	222,34	252	C5H7O
MeDc6e5oAr	54,15	463,76	156,88	193,7	225,18	252,03	294,36	325,15	371,52	C7H1O
Dc9e8oA	10,13	552,34	200,48	248,13	289,62	325,57	383,13	425,17	486,42	C9H15O
EtDc7e6oArI	11,84	542,59	202,72	251,9	294,06	330,09	387,01	428,4	490,36	C9H15O
Dc7e6oA	51,39	473,51	154,7	189,86	220,63	247,42	290,56	322,21	368,18	C7H11O
Gc7e1oE	29,67	471,21	157,57	193,34	224,09	250,46	292,37	323,16	369,66	C7H11O
Ic9e3oB	-36,9	545,81	198,12	248,15	291,17	328,07	386,64	429,46	493,34	C9H15O
Gc7e3oB	4,35	466,98	151,86	189,82	222,36	250,17	294,18	326,25	374,05	C7H11O
MeDc8e9oBrH	-18,83	553,14	197,87	248,13	291,23	328,09	386,44	429,02	492,76	C9H15O
MeDc6e7oBrF	22,43	474,3	151,78	189,78	222,3	250,05	293,86	325,74	373,41	C7H11O
Dc5e4oB	110,76	389,19	106,35	130,61	151,68	169,92	199,23	220,89	253,06	C5H7O
Ic9e4oB	-16,4	557,45	194,18	244,4	287,66	324,81	383,88	427,1	491,58	C9H15O
EtDc7e9oBr	-18,28	547,2	200,13	249,38	291,7	327,97	385,57	427,8	491,47	C9H15O

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Annexe 4: Données thermodynamiques des espèces présentes dans le mécanisme

Gc7e4oB	24,86	478,61	148,08	186,04	218,71	246,74	291,27	323,82	372,25	C7H11O
Ec5e4oB	119,97	387,43	107,08	132,39	154,02	172,47	201,53	222,64	254,05	C5H7O
MeDc6e5oBr	22,97	468,36	154	190,98	222,71	249,87	292,94	324,49	372,08	C7H1O
Dc9e8oB	-21,05	556,94	197,29	245,32	287,21	323,55	381,87	424,54	486,6	C9H15O
EtDc7e6oBrI	-19,33	547,2	199,76	249,16	291,6	327,96	385,61	427,73	490,89	C9H15O
Dc7e6oB	20,21	478,11	151,53	187,04	218,18	245,33	289,15	321,36	368,08	C7H11O
MeDc8e7oBrI	-19,33	547,2	199,76	249,16	291,6	327,96	385,61	427,73	490,89	1C9H15O
MeDc8e9oCrH	-34,98	540,96	204,95	254,38	296,53	332,41	388,96	430,28	493,24	C9H15O
MeCc6e7oDrA	6,28	462,13	158,85	195,99	227,54	254,3	296,33	326,98	373,91	C7H1O
Bc5e1oC	55,15	375,42	115,89	138,61	158,46	175,77	203,92	225,12	257,4	C5H7O
eche1oD	-157,96	411,54	151,95	200,66	241,89	276,7	330,8	369,46	426,77	C8H12O
c9e6oyA	-41	545,69	200,97	249,66	291,6	327,61	384,88	426,8	489,66	C9H15O
Ic9e3oE	-38,54	546,57	201,25	250,61	292,93	329,15	386,62	428,83	492,81	C9H15O
Hc8h15-3	110,47	492,96	172	218,14	257,89	292,05	346,42	386,32	446,66	C8H50
Ac7e4oC	6,03	379,94	154,29	190,28	220,62	246,18	286,06	315,18	361,79	C7H11O
Ic9e4oC	-38,54	546,57	201,25	250,61	292,93	329,15	386,62	428,83	492,81	C9H15O
EtDc7e9oCrH	-22,26	548,79	199,19	249,2	291,97	328,49	386,23	428,47	492,44	C9H15O
Gc7e4oC	2,72	467,73	155,14	192,22	223,95	251,06	294	325,53	373,46	C7H11O
Ac5e1oC	95,74	378,27	124,79	179,23	220,7	252,27	295,31	322,1	377,5	C5H7O
MeCc6e1oDr	19	469,95	152,98	190,76	222,97	250,39	293,6	325,15	373,04	C7H11O
Ac9e6oB	-49,58	540,75	202,8	253,47	296,63	333,3	390,82	432,44	494,96	C9H15O
Gc7h13-3	131,1	453,55	149,16	188,99	223,35	252,9	300,04	334,72	387,28	C7H30
Ac9e6oD	-18,03	558,2	196,91	246,76	289,49	326,07	384,09	426,68	491,27	C9H15O
Ac7e4oB	-3,18	462,84	152,72	192,38	225,97	254,36	298,55	330,21	377,34	C7H1O
EtDc7e6oCrI	-19	548,74	198,68	248,95	291,9	328,52	386,29	428,39	491,9	C9H15O
Dc9e8oC	-39,62	534,27	208,06	258,02	300,4	336,27	392,31	432,75	493,82	C9H15O
Dc7e1oE	1,63	455,43	162,23	199,71	231,39	258,1	299,66	329,54	374,71	C7H11O
eche1oF	-155,61	410,7	155,5	203,09	243,41	277,46	330,33	367,99	423,43	C8H12O
Ac9e6oC	-23,18	557,28	200,82	249,39	291,11	326,86	383,65	425,32	488,38	C9H15O
MeDc8e7oCrI	-19	548,74	198,68	248,95	291,9	328,52	386,29	428,39	491,9	C9H15O
MeEc8e9oDrA	-34,98	540,96	204,95	254,38	296,53	332,41	388,96	430,28	493,24	C9H15O
MeCc6e7oBrA	-20,13	445,6	160,56	200,02	233,15	260,89	303,62	333,96	379,46	C7H11O
mche1oD	-139	377,52	137,59	177,83	211,91	240,7	285,45	317,43	365,09	C7H10O
MeEc8e9oCrA	-20,46	553,89	200,79	250,49	292,96	329,2	386,5	428,47	492,35	C9H15O
MeEc8e9oyA	-43,43	541,38	204,8	253,41	295,11	330,8	387,35	428,69	491,06	C9H15O
MeCc6e7oyA	2,97	463,46	154,7	192,31	224,46	251,88	295,09	326,47	373,38	C7H11O
MeBc5e1rF	94,61	386,6	132,28	167,13	196,73	221,82	261,16	289,73	333,46	C6H10
MeDc7e8rA	108,04	488,66	175,95	221,92	261,38	295,2	348,85	388,19	447,96	C8H150
mche1oE	-144,15	376,6	141,92	180,63	213,56	241,48	285,08	316,33	362,72	C7H10O
MeEc8e9oBrH	-23,97	552,22	202,12	250,9	292,83	328,79	385,96	427,96	491,45	C9H15O
Ac9e5oC	-18,03	558,2	196,91	246,76	289,49	326,07	384,09	426,68	491,27	C9H15O

MeEc6e5oBr	-37,41	450,16	158,43	196,12	228,19	255,44	298,27	329,46	376,8	C7H11O
Ac9e5oD	-38,54	546,57	201,25	250,61	292,93	329,15	386,62	428,83	492,81	C9H15O
Ac7e3oB	-23,68	451,2	156,78	196,27	229,63	257,74	301,37	332,57	379,09	C7H11O
EtDc7e1oCrI	-34,35	538,03	197,58	249,95	294,29	331,76	390,14	432,13	495	C9H15O
Dc7e1oC	-15,82	446,43	162,72	200,94	233,11	260,15	302,13	332,46	379,36	C7H11O
EtDc7e9oyA	-37,74	536,36	202,76	251,88	293,99	330	386,97	428,54	491,09	C9H15O
EtCc6e1rH	13,73	483,63	173,96	220,39	260,25	294,38	348,51	388,11	448,09	C8H150
MeEc8e1oDr	-13,85	549,66	194,32	246,11	290,27	327,83	386,78	429,39	492,88	C9H15O
MeEc8e1oyI	-36,82	537,15	199	249,27	292,39	329,27	387,53	429,81	492,6	C9H15O
c6e1e5oC	-38,79	394,88	121,65	153,37	179,98	202,27	236,68	261,29	298,76	C6H8O
Ec8h15-1	110,97	493,38	171,2	216,35	255,69	289,82	344,62	384,9	444,49	C8H150
Ac9e5oB	-49,58	540,75	202,8	253,47	296,63	333,3	390,82	432,44	494,96	C9H15O
EtDc7e9oBrA	-46,32	531,42	204,6	255,69	299,01	335,67	392,91	434,16	496,33	C9H15O
MeCc6e1r	34,36	444,22	150,9	191,2	225,78	255,36	302,26	336,59	388,74	C7H13
EtDc7e1oHrI	-45,4	532,22	200,54	252,96	297,4	334,96	393,44	435,3	497,52	C9H15O
Fc9e1oE	-16,86	448,03	203,79	253,95	295,94	331,04	385,1	423,82	484,45	C9H15O
c7e1e6oC	-64,56	433,38	149,2	185,45	216,1	242,01	282,52	312,02	357,69	C7H0O
c9e5oyA	-41	545,69	200,97	249,66	291,6	327,61	384,88	426,8	489,66	C9H15O
EtDc7e9oCrA	-19,71	547,15	200,13	249,38	291,7	327,97	385,57	427,8	491,47	C9H15O
Ac8h15-4	110,47	492,96	172	218,14	257,89	292,05	346,42	386,32	446,66	C8H50
EtBc5e7oyA	1,17	458,36	152,51	190,79	223,47	251,28	294,96	326,52	373,46	C7H1O
Fc9e1oC	-38,03	546,99	199,71	248,62	290,86	327,21	385,04	427,18	489,26	C9H15O
MeEc8e1oCrI	-36,32	615,9	210,97	262,48	306,36	343,6	401,82	443,52	503,71	C9H15O
EtDc7e1oyI	-38,79	536,36	202,47	251,68	293,88	329,96	386,99	428,45	490,4	C9H15O
MeDc7e1rH	12,69	483,63	173,93	220,24	260,06	294,21	348,44	388,18	448,23	C8H50
Fc9e1oD	-17,53	558,62	195,59	244,78	287,35	324,03	382,42	424,9	487	C9H15O
c7e1e6oD	-46,95	436,81	143,76	179,72	210,66	237,19	279,23	309,8	354,88	C7H0O
ch2cco	169,32	134,83	37,74	44,94	51,12	56,37	64,46	70,07	79,03	C3H2O
EtDc7e3oIr	0,76	555,77	198,41	248,63	291,63	328,36	386,39	428,66	492,09	C9H15O
Etall	142,3	329,98	102,74	127,73	149,48	168,25	197,99	219,39	252,68	C5H80
EpchqDqB	-217,12	577,16	240,34	310,21	369,33	419,07	495,38	548,05	619,01	C9H17O4
Fc6e1e4	224,45	374,8	116,43	148,44	175,32	197,84	232,55	257,28	294,87	C6H90
mche1qDqF	-234,95	475,94	202,94	255,02	298,13	333,66	387,01	423,54	475,75	C7H12O4
mche1qDojF	-82,68	445,05	178,03	226,61	266,88	300,15	350,25	384,77	434,79	C7H11O3
MeEc8e9oAqC	-300,77	603,43	244,35	299,94	346,89	386,47	447,98	492,16	558,37	C9H16O3
MeEc6e5oAqCr	-109,88	510,71	198,74	239,75	274,02	302,61	346,4	377,41	423,63	C7H11O3
Dc4oAqC	-104,73	430,53	136,22	161,47	182,71	200,54	228,08	247,68	276,49	C4H7O3
FMeCc6e7oAqEr	-49,33	536,44	190,8	233,62	269,28	298,88	343,84	375,16	420,79	C7H11O3
MeCc6e5e7oA	-24,02	442,67	146,32	183,42	214,74	241,14	282,17	311,64	356,09	C7H10O
MeCc6e5e7oyA	130,39	447,35	142,84	177,42	206,55	231,03	268,94	296,03	336,68	C7H9O
MeBc5e1e4rF	222,02	370,49	120,21	152,18	178,84	201,04	235,02	259,14	296,19	C6H90

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

MeEc8e9oAojC	-148,5	566,78	219,64	271,54	315,47	352,6	410,49	452,27	515,67	C9H15O2
MeCc6e7oA	-151,43	458,78	158,18	198,31	232,66	261,99	308,32	342,07	392,77	C7H12O
Ic9e3qFqH	-116,03	665,87	267,79	330,02	381,86	424,92	490,35	535,96	602,37	C9H17O4
c9e1e6qD	-91,97	572,01	222,08	278,72	326,3	366,18	427,68	471,48	537,16	C9H16O2
c9e1e6ojD	60,3	535,35	197,77	250,37	294,72	332,05	389,84	431,15	493,54	C9H15O
c6e3oA	-128,37	423,67	131,33	165,37	194,64	219,73	259,53	288,58	331,95	C6H10O
c6e3oyA	26,03	428,36	127,85	159,38	186,45	209,62	246,29	272,97	312,56	C6H9O
BchxqAqC	-136,12	467,11	174,35	222,23	263,02	297,52	350,52	386,69	432,98	C6H1O4
c9e6oAqE	-294,03	605,74	241,01	297,09	344,5	384,5	446,73	491,44	558,21	C9H16O3
c9e6oAojE	-141,76	569,08	215,82	268,56	313,15	350,78	409,32	451,38	514,83	C9H15O2
MeEc8e1oIqD	-294,16	599,21	237,13	295,51	344,67	385,92	449,45	494,29	559,71	C9H16O3
MeEc8e1oIojD	-141,89	562,55	213,24	267,14	312,71	351,13	410,75	453,33	516,76	C9H15O2
pche5qH	-177,75	499,2	204,78	268,46	321,54	365,68	432,9	479,98	549,57	C9H16O2
pche5ojH	-25,48	462,54	181,92	240,17	289,28	330,56	394,24	439,29	505,49	C9H15O
EtDc7e1oIrC	-64,27	521,38	198,55	248,4	291,31	328,14	386,62	429,36	493,21	C9H15O
pche4qH	-183,44	504,22	207,36	270,03	322,41	366,09	432,87	479,86	549,45	C9H16O2
pche4ojH	-31,17	467,57	184,02	241,75	290,44	331,38	394,6	439,41	505,48	C9H15O
MeEc8e9oArD	-70,67	524,81	202,12	250,39	292,23	328,38	386,28	428,93	492,7	C9H15O
c9e6oAqD	-298,34	607,74	240,64	296,19	343,31	383,19	445,48	490,37	557,38	C9H16O3
c9e6oAojD	-146,07	571,09	215,72	267,77	311,97	349,43	408,03	450,37	514,26	C9H15O2
BchxqAqD	-136,12	467,11	174,35	222,23	263,02	297,52	350,52	386,69	432,98	C6H1O4
chxe1qD	-107,75	386,72	137,92	179,65	214,75	244,14	289,08	320,24	364,08	C6H10O2
chxe1ojD	44,73	346,38	113,55	152,47	185,19	212,61	254,63	283,99	325,8	C6H9O
ac3h4hco1	171,77	327,14	87,26	107,16	124,03	138,27	160,34	175,88	197,8	C4H5O
pche6qI	-177,75	499,2	204,78	268,46	321,54	365,68	432,9	479,98	549,57	C9H16O2
pche6ojI	-25,48	462,54	181,92	240,17	289,28	330,56	394,24	439,29	505,49	C9H15O
MeEc8e1oIrC	-51,05	516,52	196,04	247,67	291,9	329,68	389,23	432,3	495,96	C9H15O
pche5qI	-177,75	499,2	204,78	268,46	321,54	365,68	432,9	479,98	549,57	C9H16O2
pche5ojI	-25,48	462,54	181,92	240,17	289,28	330,56	394,24	439,29	505,49	C9H15O
Fc9e4oA	-55,23	525,06	197,99	248,06	291,11	328,03	386,57	429,28	492,96	C9H15O
c7e4e6oA	-44,56	429,49	153,11	189,37	219,75	245,2	284,62	313,15	357,93	C7H0O
c7e4e6oyA	109,84	434,17	149,64	183,37	211,55	235,08	271,37	297,54	338,55	C7H9O
Ec6h9-13	196,46	354,59	116,97	149,86	177,22	199,94	234,63	259,2	297,24	C6H90
Fc6h9-13	261,31	381,45	120,18	151,69	177,89	199,66	232,95	256,66	293,87	C6H90
AchxqBqD	-136,12	467,11	174,35	222,23	263,02	297,52	350,52	386,69	432,98	C6H11O4
c9e6oAqC	-298,34	607,74	240,64	296,19	343,31	383,19	445,48	490,37	557,38	C9H16O3
c9e6oAojC	-146,07	571,09	215,72	267,77	311,97	349,43	408,03	450,37	514,26	C9H15O2
c7e4oA	-154,15	462,17	158,4	197,28	230,8	259,61	305,47	339,08	389,46	C7H12O
c6e2e5oA	-31,09	391,37	125,81	157,7	184,18	206,12	239,45	262,86	298,11	C6H8O
c6e2e5oyA	98,21	385,55	125,04	153,83	177,5	196,93	226,13	246,54	277,96	C6H7O
Dc6e5oAoC	-45,82	438,23	132,55	164,79	191,54	213,66	247	269,96	303,04	C6H7O2

Fc6e3oAoE	-78,12	432,25	135,45	166,79	192,94	214,67	247,68	270,62	303,66	C6H7O2
c9oAoF	-422,99	574,85	224,62	274,87	318,44	356,11	416,55	461,2	528,04	C9H16O2
MeEc8oAoI	-397,6	568,2	219,86	272,52	317,94	356,97	419,04	464,37	531,66	C9H16O2
MeEc8oyAoI	-243,19	572,89	216,37	266,53	309,74	346,86	405,8	448,76	512,26	C9H15O2
MeEc8oAoyI	-243,19	572,89	216,37	266,53	309,74	346,86	405,8	448,76	512,26	C9H15O2
EtDc7oAoI	-399,56	567,41	223,64	275,01	319,43	357,68	418,6	463,06	528,52	C9H16O2
EtDc7oAoyI	-245,16	572,09	220,3	269,07	311,21	347,48	405,23	447,4	509,67	C9H15O2
EtDc7oyAoI	-245,16	572,09	220,3	269,07	311,21	347,48	405,23	447,4	509,67	C9H15O2
c9e8oD	-218,66	526,62	205,52	257,17	301,29	338,77	397,69	442,05	540,99	C9H16O
Hc8oD	-117,12	526,82	192,34	237,39	276,46	310,26	364,64	405,15	466,95	C8H15O
MeDc7oHrA	-91,72	520,16	187,79	235,09	275,96	311,16	367,28	408,4	469,59	C8H15O
Ec8oA	-95,4	529,12	189,19	233,78	272,99	307,28	362,82	403,82	463,65	C8H15O
EtCc6oArH	-93,69	519,37	191,53	237,59	277,43	311,78	366,68	407,11	467,85	C8H15O
MeDc7oArH	-93,69	519,37	191,53	237,59	277,43	311,78	366,68	407,11	467,85	C8H15O
VINacrol	-28,29	335,38	108,57	135,39	157,03	174,32	198,77	213,79	231,58	C5H6O

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

ANNEXE 5: MÉCANISME CINÉTIQUE

Les constantes de vitesse sont données sous la forme d'une loi d'Arrhénius modifiée:

$$k = A \times T^n \times \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

avec A: facteur préexponentiel (cm^3, mol^{-1}, s^{-1})

T: température (K)

E: énergie d'activation ($cal.mol^{-1}$)

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

1.	ch3+oh=ch2oh+H			1.99E+19	-1.7	11157.0	
2.	ch3+oh=ch3o+H			9.95E+14	-0.8	16872.0	
3.	ch3+oh=sch2+h2o			7.20E+13	0.0	2780.0	
4.	ch3+oh=ch2o+H2			7.39E+14	-1.1	14551.0	
5.	c2h3+o2=ch2hco+O			3.81E+17	-1.4	5580.0	
6.	c2h3+o2=ch2o+hco			3.71E+25	-4.0	7043.0	
7.	c2h3+o2=chocho+H			7.78E+20	-2.9	5541.0	
8.	c2h3+o2=c2h2+ho2			3.25E+19	-2.3	7932.0	
9.	c3h3+c3h3=c6h5+H			3.67E+26	-3.9	28960.0	
10.	c3h3+c3h3=c6h6			3.89E+50	-11.0	20320.0	
11.	c3h3+c3h3=FULVENE			1.07E+61	-14.0	28084.0	
	Declared duplicate reaction...						
12.	c3h3+c3h3=FULVENE			3.20E+28	-5.0	4517.0	
	Declared duplicate reaction...						
13.	c3h3+c3h3=FULVENE			5.62E+60	-13.9	27093.0	
	Declared duplicate reaction...						
14.	c3h3+c3h3=FULVENE			7.98E+29	-5.5	4665.0	
	Declared duplicate reaction...						
15.	FULVENE=c6h6			2.95E+31	-5.0	88465.0	
16.	FULVENE=c6h5+H			8.51E+24	-2.5	113330.0	
17.	nc4h5+c2h2=c6h6+H			1.69E+16	-1.0	8968.0	
18.	nc4h5+c2h2=FULVENE+H			1.74E+19	-1.9	12384.0	
19.	ic4h5+c2h2=c6h6+H			8.25E+24	-3.8	26565.0	
20.	ic4h5+c2h2=FULVENE+H			9.74E+26	-3.8	21329.0	
21.	H+H+M=H2+M			1.00E+18	-1.0	0.0	
	H2o Enhanced by 1.625E+01						
	co Enhanced by 1.875E+00						
	co2 Enhanced by 3.750E+00						
	ch4 Enhanced by 1.625E+01						
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01						
	H2 Enhanced by 2.500E+00						
	ar Enhanced by 7.500E-01						
22.	H+o2=oh+O			1.90E+14	0.0	16812.0	
23.	H+o2+M=ho2+M			8.00E+17	-0.8	0.0	
	h2o Enhanced by 1.625E+01						
	co Enhanced by 1.875E+00						
	co2 Enhanced by 3.750E+00						
	ch4 Enhanced by 1.625E+01						
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01						
	H2 Enhanced by 2.500E+00						
	ar Enhanced by 4.000E-01						
24.	H+oh+M=h2o+M			3.00E+22	-2.0	0.0	
	h2o Enhanced by 1.625E+01						
	co Enhanced by 1.875E+00						
	co2 Enhanced by 3.750E+00						
	ch4 Enhanced by 1.625E+01						
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01						
	H2 Enhanced by 2.500E+00						
25.	H2+o2=oh+oh			1.70E+13	0.0	47780.0	
26.	O+H2=oh+H			1.30E+04	2.8	5922.0	
27.	H2+oh=h2o+H			2.16E+08	1.5	3430.0	
28.	O+O+M=o2+M			1.14E+17	-1.0	0.0	
	h2o Enhanced by 1.625E+01						
	co Enhanced by 1.875E+00						
	co2 Enhanced by 3.750E+00						
	ch4 Enhanced by 1.625E+01						
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01						
	H2 Enhanced by 2.500E+00						
	ar Enhanced by 7.500E-01						
29.	O+H+M=oh+M			6.20E+16	-0.6	0.0	
	h2o Enhanced by 1.625E+01						
	co Enhanced by 1.875E+00						
	co2 Enhanced by 3.750E+00						
	ch4 Enhanced by 1.625E+01						
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01						
	H2 Enhanced by 2.500E+00						
	ar Enhanced by 7.500E-01						
30.	h2o+O=oh+oh			1.50E+10	1.1	17260.0	
31.	oh+oh(+M)=h2o2(+M)			7.22E+13	-0.4	0.0	
	Low pressure limit:			2.21E+19	-0.76	0.0	
	TROE centering	0.50	1.00E+08	1.00E-06			
32.	ho2+oh=h2o+o2			1.45E+13	0.0	-497.0	
33.	ho2+O=oh+o2			2.44E+13	0.0	-446.0	
34.	H+ho2=H2+o2			2.14E+13	0.0	1411.0	
35.	H+ho2=oh+oh			8.40E+13	0.0	875.0	
36.	H+ho2=h2o+O			3.01E+13	0.0	1721.0	
37.	ho2+ho2=h2o2+o2			4.20E+14	0.0	11982.0	
	Declared duplicate reaction...						
38.	ho2+ho2=h2o2+o2			1.30E+11	0.0	-1630.0	
	Declared duplicate reaction...						
39	h2o2+oh=ho2+h2o			5,80E+14	0,0	9557,0	
40.	h2o2+H=ho2+H2			1.70E+12	0.0	3750.0	
41.	h2o2+H=h2o+oh			1.00E+13	0.0	3590.0	
42.	h2o2+O=ho2+oh			2.80E+13	0.0	6400.0	
43.	co+ho2=co2+oh			1.15E+05	2.3	17550.0	
44.	co+oh=co2+H			4.40E+06	1.5	-740.0	
45.	co+O+M=co2+M			2.83E+13	0.0	-4540.0	
	h2o Enhanced by 1.625E+01						
	co Enhanced by 1.875E+00						
	co2 Enhanced by 3.750E+00						
	ch4 Enhanced by 1.625E+01						
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01						
	H2 Enhanced by 2.500E+00						
	ar Enhanced by 7.500E-01						
46.	co+o2=co2+O			2.53E+12	0.0	47700.0	
47.	hco+M=H+co+M			2.30E+17	-1.0	17090.0	
	h2o Enhanced by 1.625E+01						
	co Enhanced by 1.875E+00						
	co2 Enhanced by 3.750E+00						
	ch4 Enhanced by 1.625E+01						

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

c2h6 Enhanced by 1.625E+01						
H2 Enhanced by 2.500E+00						
ar Enhanced by 7.500E-01						
48.hco+oh=co+h2o				1.00E+14	0.0	0.0
49.hco+O=co+oh				3.00E+13	0.0	0.0
50.hco+O=co2+H				3.00E+13	0.0	0.0
51.hco+H=co+H2				7.22E+13	0.0	0.0
52.hco+o2=co+ho2				7.58E+12	0.0	410.0
53.hco+ch3=co+ch4				1.20E+14	0.0	0.0
54.hco+ho2=co2+oh+H				3.00E+13	0.0	0.0
55.hco+hco=ch2o+co				1.20E+13	0.0	0.0
56.hco+hco=H2+co+co				3.00E+12	0.0	0.0
57.hco+c2h6=ch2o+c2h5				4.70E+04	2.7	18235.0
58.ch4+o2=ch3+ho2				4.00E+13	0.0	56900.0
59.ch4(+M)=ch3+H(+M)				2.40E+16	0.0	104913.0
Low pressure limit:				4.50E+17	0.0	90800.0
TROE centering	0,64	1,00E-15	3195,0	12126,0		
60.ch4+oh=ch3+h2o				1.60E+06	2.1	2462.0
61.ch4+O=ch3+oh				1.62E+06	2.3	7094.0
62.ch4+H=ch3+H2				2.25E+04	3.0	8756.6
63.ch4+CH2=ch3+ch3				4.30E+12	0.0	10038.0
64.ch3+M=CH2+H+M				1.90E+16	0.0	91600.0
h2o Enhanced by 1.625E+01						
co Enhanced by 1.875E+00						
co2 Enhanced by 3.750E+00						
ch4 Enhanced by 1.625E+01						
c2h6 Enhanced by 1.625E+01						
H2 Enhanced by 2.500E+00						
ar Enhanced by 7.500E-01						
65.ch3+M=CH+H2+M				6.90E+14	0.0	82460.0
h2o Enhanced by 1.625E+01						
co Enhanced by 1.875E+00						
co Enhanced by 1.875E+00						
ch4 Enhanced by 1.625E+01						
c2h6 Enhanced by 1.625E+01						
H2 Enhanced by 2.500E+00						
ar Enhanced by 7.500E-01						
66.ch3+ho2=ch3o+oh				5.00E+12	0.0	0.0
67.ch3+h2o2=ch4+ho2				6.10E+09	0.0	-596.0
68.ch3+O=H+ch2o				8.43E+13	0.0	0.0
69.ch3+O=>H+H2+co				3.37E+13	0.0	0.0
70.ch3+o2=ch2o+oh				6.62E+11	0.0	14188.0
71.ch3+o2=ch3o+O				6.60E+13	0.0	31398.0
72.ch3+ch3=c2h5+H				3.01E+13	0.0	13513.0
73.ch3+ch3(+M)=c2h6(+M)				9.21E+16	-1.2	635.8
Low pressure limit:				1.135E+36	-5.25	1705.0
TROE centering	0,405	1120,0	69,6	1,00E+15		
74.ch3+ch3o=ch4+ch2o				2.41E+13	0.0	0.0
75.ch3+ch2oh=ch4+ch2o				2.41E+12	0.0	0.0
76.ch3+o2(+M)=ch3o2(+M)				7.80E+08	1.2	0.0
Low pressure limit:				5.80E+25	-3.3	0.0
TROE centering	0.664	1.00E+05	10.0			

77.ch3+H=CH2+H2				7.00E+13	0.0	15100.0
78.CH2+oh=CH+h2o				1.13E+07	2.0	3000.0
79.CH2+oh=ch2o+H				2.50E+13	0.0	0.0
80.CH2+O=co+H+H				5.00E+13	0.0	0.0
81.CH2+O=co+H2				6.00E+13	0.0	0.0
82.CH2+H=CH+H2				3.50E+14	0.0	0.0
83.CH2+o2=hco+oh				4.30E+10	0.0	-500.0
84.CH2+o2=co2+H2				3.45E+11	0.0	1000.0
85.CH2+o2=co2+H+H				1.60E+12	0.0	1000.0
86.CH2+o2=co+h2o				1.87E+10	0.0	-1000.0
87.CH2+o2=co+oh+H				8.64E+10	0.0	-500.0
88.CH2+o2=ch2o+O				5.00E+13	0.0	9000.0
89.CH2+co2=ch2o+co				1.10E+11	0.0	1000.0
90.CH2+CH2=c2h2+H2				3.20E+13	0.0	0.0
91.CH2+CH2=c2h2+H+H				4.00E+13	0.0	0.0
92.CH2+ch3=c2h4+H				4.00E+13	0.0	0.0
93.CH2+CH=c2h2+H				4.00E+13	0.0	0.0
94.CH2+c2h2=H+c3h3				1.20E+13	0.0	6620.0
95.CH2+c2h4=c3h6				4.30E+12	0.0	10038.0
96.CH2+c2h6=ch3+c2h5				6.50E+12	0.0	7911.0
97.sch2+M=CH2+M				1.00E+13	0.0	0.0
h2o Enhanced by 1.625E+01						
co Enhanced by 1.875E+00						
co2 Enhanced by 3.750E+00						
ch4 Enhanced by 1.625E+01						
c2h6 Enhanced by 1.625E+01						
H2 Enhanced by 2.500E+00						
ar Enhanced by 7.500E-01						
98.sch2+o2=co+oh+H				3.00E+13	0.0	0.0
99.sch2+H2=ch3+H				7.00E+13	0.0	0.0
100.sch2+H=CH2+H				2.00E+14	0.0	0.0
101.sch2+H=CH+H2				3.00E+13	0.0	0.0
101.sch2+H=CH+H2				3.00E+13	0.0	0.0
103.sch2+O=co+H2				1.50E+13	0.0	0.0
104.sch2+oh=ch2o+H				3.00E+13	0.0	0.0
105.sch2+ho2=ch2o+oh				3.00E+13	0.0	0.0
106.sch2+h2o2=ch3o+oh				3.00E+13	0.0	0.0
107.sch2+h2o(+M)=ch3oh(+M)				4.82E+17	-1.2	1145.0
Low pressure limit:				1.88E+38	-6.36	5040.0
TROE centering	0.6027	208.0	3922.0	10180.0		
h2o Enhanced by 1.625E+01						
co Enhanced by 1.875E+00						
co2 Enhanced by 3.750E+00						
ch4 Enhanced by 1.625E+01						
c2h6 Enhanced by 1.625E+01						
H2 Enhanced by 2.500E+00						
ar Enhanced by 7.500E-01						
108.sch2+ch2o=ch3+hco				1.20E+12	0.0	0.0
109.sch2+hco=ch3+co				1.80E+13	0.0	0.0
110.sch2+ch3=c2h4+H				1.80E+13	0.0	0.0
111.sch2+ch4=ch3+ch3				4.00E+13	0.0	0.0
112.sch2+c2h6=ch3+c2h5				1.20E+14	0.0	0.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

113.	sch2+c2h4=ac3h5+H			1.30E+14	0.0	0.0
114.	sch2+c2h2=c3h3+H			1.80E+14	0.0	0.0
115.	sch2+h2o=CH2+h2o			3.00E+13	0.0	0.0
116.	sch2+co2=ch2o+co			3.00E+12	0.0	0.0
117.	sch2+ch2co=c2h4+co			1.60E+14	0.0	0.0
118.	CH+oh=hco+H			3.00E+13	0.0	0.0
119.	CH+O=co+H			1.80E+14	0.0	0.0
120.	CH+O=C+oh			1.80E+14	0.0	0.0
121.	CH+o2=hco+O			1.00E+13	0.0	0.0
122.	CH+o2=co+oh			1.00E+13	0.0	0.0
123.	CH+co2=hco+co			3.40E+12	0.0	690.0
124.	CH+h2o=ch2o+H			1.71E+13	0.0	-755.0
125.	CH+ch4=c2h4+H			6.00E+13	0.0	0.0
126.	CH+ch3=c2h3+H			3.00E+13	0.0	0.0
127.	ch3+oh(+M)=ch3oh(+M)			5.65E+13	0.1	0.0
	Low pressure limit:			5.75E+41	-7.4	626.0
	TROE centering	0.025	1.00E-15	8000.0	3000.0	
	h2o Enhanced by 1.600E+01					
	co Enhanced by 2.000E+00					
	co2 Enhanced by 3.000E+00					
	H2 Enhanced by 2.000E+00					
	ar Enhanced by 7.500E-01					
128.	ch3oh(+M)=ch2oh+H(+M)			2.69E+16	-0.1	98940.0
	Low pressure limit:			2.34E+40	-6.33	103100.0
	TROE centering	0.773	693.0	5333.0	1.00E-10	0
129.	ch3oh+o2=ch2oh+ho2			2.05E+13	0.0	44910.0
130.	ch3oh+o2=ch3o+ho2			2.50E+12	0.0	55000.0
131.	ch3oh+ho2=ch2oh+h2o2			4.82E+10	0.0	12580.0
132.	ch3oh+oh=ch2oh+h2o			1.30E+13	0.0	5960.0
133.	ch3oh+oh=ch3o+h2o			1.30E+13	0.0	5960.0
134.	ch3oh+O=ch2oh+oh			1.63E+13	0.0	5030.0
135.	ch3oh+H=ch2oh+H2			3.20E+13	0.0	6095.0
135.	ch3oh+H=ch2oh+H2			3.20E+13	0.0	6095.0
137.	ch3oh+H=ch3+h2o			1.70E+13	0.0	5311.0
138.	ch3oh+ch2o=ch3o+ch3o			1.55E+12	0.0	79570.0
139.	ch3oh+ch3=ch2oh+ch4			3.57E+11	0.0	8663.0
140.	ch3oh+ch3=ch3o+ch4			4.68E+05	2.3	12764.0
141.	ch2oh+M=ch2o+H+M			1.00E+14	0.0	25100.0
	h2o Enhanced by 1.000E+00					
	co Enhanced by 1.875E+00					
	co2 Enhanced by 3.750E+00					
	ch4 Enhanced by 1.625E+01					
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01					
	H2 Enhanced by 2.500E+00					
	ar Enhanced by 7.500E-01					
142.	ch2oh+H=ch2o+H2			3.00E+13	0.0	0.0
143.	ch2oh+o2=ch2o+ho2			2.17E+14	0.0	4690.0
144.	ch2oh+O=ch2o+oh			4.20E+13	0.0	0.0
145.	ch2oh+ho2=ch2o+h2o2			1.20E+13	0.0	0.0
146.	ch2oh+hco=ch3oh+co			1.00E+13	0.0	0.0
147.	ch3o+M=ch2o+H+M			4.88E+15	0.0	22773.0
	h2o Enhanced by 1.625E+01					
	co Enhanced by 1.875E+00					
	co2 Enhanced by 3.750E+00					
	ch4 Enhanced by 1.625E+01					
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01					
	H2 Enhanced by 2.500E+00					
	ar Enhanced by 7.500E-01					
148.	ch3o+ho2=ch2o+h2o2			3.00E+11	0.0	0.0
149.	ch3o+oh=ch2o+h2o			1.00E+13	0.0	0.0
150.	ch3o+O=ch2o+oh			1.30E+13	0.0	0.0
151.	ch3o+H=ch2o+H2			2.00E+13	0.0	0.0
152.	ch3o+o2=ch2o+ho2			2.35E+10	0.0	1788.0
153.	ch3o+ch2o=ch3oh+hco			1.15E+11	0.0	1280.0
154.	ch3o+co=ch3+co2			1.57E+13	0.0	11804.0
155.	ch3o+hco=ch3oh+co			9.00E+13	0.0	0.0
156.	ch3o+c2h5=ch2o+c2h6			2.41E+13	0.0	0.0
157.	ch3o+c2h3=ch2o+c2h4			2.41E+13	0.0	0.0
158.	ch3o+c2h4=ch2o+c2h5			1.20E+11	0.0	7000.0
159.	ch3o2+ho2=ch3o2h+o2			2.90E+11	0.0	1552.0
160.	ch3o2h+oh=ch3o2+h2o			1.15E+12	0.0	-380.0
161.	ch3o2h+O=oh+ch3o2			2.00E+13	0.0	4750.0
162.	ch3o2h+H=ch3o2+H2			8.80E+10	0.0	1860.0
163.	ch3o2h+H=ch3o+h2o			8.20E+10	0.0	1860.0
164.	ch2o+ch3o2=hco+ch3o2h			2.00E+12	0.0	11700.0
165.	ch3o2+ch4=ch3+ch3o2h			1.80E+11	0.0	18500.0
166.	ch3o2+ch3oh=ch2oh+ch3o2h			1.80E+12	0.0	13712.0
167.	ch3o2+ho2=ch2o+h2o+o2			1.80E+10	0.0	-1431.0
168.	ch3o2+ch3o2=ch2o+ch3oh+o2			1.05E+09	0.0	-3589.0
169.	ch3o2+ch3o2=ch3o+ch3o+o2			7.74E+10	0.0	-61.0
170.	ch3o2+c2h6=ch3o2h+c2h5			2.95E+11	0.0	15000.0
171.	ch3o2+ch3=ch3o+ch3o			1.00E+12	0.0	-1411.0
172.	ch3o2+oh=ch3oh+o2			6.00E+13	0.0	0.0
173.	ch3o2+H=ch3o+oh			9.60E+13	0.0	0.0
173.	ch3o2+H=ch3o+oh			9.60E+13	0.0	0.0
175.	ch3o2+O=ch3o+o2			3.60E+13	0.0	0.0
176.	ch3o2+ch3o=ch3o2h+ch2o			3.00E+11	0.0	0.0
177.	ch3o2+ch2oh=ch2o+ch3o2h			1.20E+13	0.0	0.0
178.	ch3o2+c2h5o2=o2+ch3o+c2h5o			7.74E+10	0.0	-61.0
179.	ch3o2h=ch3o+oh			6.30E+14	0.0	42300.0
180.	ch2o+oh=hco+h2o			1.72E+09	1.2	-447.0
181.	ch2o+ch3=hco+ch4			7.80E-08	6.1	1970.0
182.	ch2o+M=hco+H+M			5.85E+14	0.0	64200.0
	h2o Enhanced by 1.625E+01					
	co Enhanced by 1.875E+00					
	co2 Enhanced by 3.750E+00					
	ch4 Enhanced by 1.625E+01					
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01					
	H2 Enhanced by 2.500E+00					
	ar Enhanced by 7.500E-01					
183.	ch2o+ho2=hco+h2o2			2.20E+06	2.0	12000.0
184.	ch2o+O=hco+oh			1.81E+13	0.0	3088.0
185.	ch2o+H=hco+H2			1.10E+08	1.8	3000.0
186.	ch2o+o2=hco+ho2			1.23E+06	3.0	52000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

187.	c2h6+ho2=c2h5+h2o2			8.00E+11	0.0	17600.0
188.	c2h6+oh=c2h5+h2o			5.11E+06	2.1	854.0
189.	c2h6+O=c2h5+oh			9.99E+08	1.5	5803.0
190.	c2h6+H=c2h5+H2			5.25E+14	0.0	12800.0
191.	c2h6+o2=c2h5+ho2			1.00E+13	0.0	51000.0
192.	c2h6+ch3o=c2h5+ch3oh			3.02E+11	0.0	7000.0
193.	c2h6+ch3=c2h5+ch4			7.54E+00	3.7	9883.0
194.	c2h5+ho2=c2h4+h2o2			3.00E+11	0.0	0.0
195.	c2h5+oh=c2h4+h2o			2.41E+13	0.0	0.0
196.	c2h5+oh=>ch3+ch2o+H			2.41E+13	0.0	0.0
197.	c2h5+O=ch2o+ch3			4.24E+13	0.0	0.0
198.	c2h5+O=ch3hco+H			5.30E+13	0.0	0.0
199.	c2h5+O=c2h4+oh			3.05E+13	0.0	0.0
200.	c2h5+H=c2h4+H2			1.25E+14	0.0	8000.0
201.	c2h5+o2=ch3hco+oh			1.58E+14	-1.2	10390.0
202.	c2h5+ch3=c2h4+ch4			1.14E+12	0.0	0.0
203.	c2h5+c2h5=c2h4+c2h6			1.40E+12	0.0	0.0
204.	c2h5+o2=c2h5o+O			1.10E+13	-0.2	27937.0
205.	c2h4+H(+M)=c2h5(+M)			3.97E+09	1.3	1292.0
	Low pressure limit:			2.790E+18	0.0	755.0
	TROE centering	0.760	40.0	1025.0		
206.	c2h5+o2=c2h5o2			7.62E+38	-9.2	5226.0
207.	c2h5+o2(+M)=c2h4+ho2(+M)			6.85E+12	6.5	-834.0
	Low pressure limit:			1.41E+07	1.09	-1975.0
	TROE centering	0.000	850.0	850.0	2000.0	
	h2o Enhanced by 1.625E+01					
	co Enhanced by 1.875E+00					
	co2 Enhanced by 3.750E+00					
	ch4 Enhanced by 1.625E+01					
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01					
	H2 Enhanced by 2.500E+00					
	ar Enhanced by 7.500E-01					
208.	c2h4+M=c2h2+H2+M			3.00E+17	0.0	79350.0
	h2o Enhanced by 1.625E+01					
	co Enhanced by 1.875E+00					
	co2 Enhanced by 3.750E+00					
	ch4 Enhanced by 1.625E+01					
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01					
	H2 Enhanced by 2.500E+00					
	ar Enhanced by 7.500E-01					
209.	c2h4+M=c2h3+H+M			2.97E+17	0.0	96560.0
	h2o Enhanced by 1.625E+01					
	co Enhanced by 1.875E+00					
	co2 Enhanced by 3.750E+00					
	ch4 Enhanced by 1.625E+01					
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01					
	H2 Enhanced by 2.500E+00					
	ar Enhanced by 7.500E-01					
210.	c2h4+c2h4=c2h5+c2h3			5.00E+14	0.0	64700.0
211.	c2h4+ch3=c2h3+ch4			4.15E+12	0.0	11128.0
212.	c2h4+ho2=ch3hco+oh			6.02E+09	0.0	7950.0
213.	c2h4+ho2=c2h4o+oh			6.22E+12	0.0	15900.0
214.	c2h4+oh=c2h3+h2o			1.64E+13	0.0	5936.0
215.	c2h4+H=c2h3+H2			4.49E+07	2.1	13366.0
216.	c2h4+o2=c2h3+ho2			4.00E+13	0.0	61500.0
217.	c2h4+O=ch3+hco			1.20E+08	1.4	530.0
218.	c2h4+O=ch2hco+H			2.00E+08	1.4	530.0
219.	c2h3+ho2=>ch3+co+oh			3.00E+13	0.0	0.0
220.	c2h3+oh=c2h2+h2o			3.00E+13	0.0	0.0
221.	c2h3+H=c2h2+H2			3.00E+13	0.0	0.0
222.	c2h3+O=ch3+co			1.50E+13	0.0	0.0
223.	c2h3+O=ch2co+H			1.50E+13	0.0	0.0
224.	c2h3+CH=CH2+c2h2			5.00E+13	0.0	0.0
225.	c2h3+CH2=ac3h4+H			3.00E+13	0.0	0.0
226.	c2h3+ch3=c2h2+ch4			3.91E+11	0.0	0.0
227.	c2h3+c2h6=c2h4+c2h5			1.50E+13	0.0	10000.0
228.	c2h3+c2h=c2h2+c2h2			9.64E+11	0.0	0.0
229.	c2h3+c2h2=c4h4+H			2.00E+12	0.0	5000.0
230.	c2h3+hco=c2h4+co			9.03E+13	0.0	0.0
231.	c2h3+ch2o=c2h4+hco			5.42E+03	2.8	5862.0
232.	c2h3+c2h3=c2h2+c2h4			1.08E+13	0.0	0.0
233.	c2h3+c2h3=c4h6			5.00E+13	0.0	0.0
234.	c2h3+c2h4=c4h6+H			1.27E+12	0.0	7305.0
235.	c2h2+oh(+M)=c2h2oh(+M)			2.29E+13	0.0	1808.0
	Low pressure limit:			7.44E+26	-3.1	1808.0
	TROE centering	0.170	180.0	50000.0	12772.0	
236.	c2h2+o2=hcco+oh			2.00E+08	1.5	30100.0
237.	c2h2+o2=c2h+ho2			1.21E+13	0.0	74520.0
238.	c2h2+ho2=ch2co+oh			6.09E+09	0.0	7948.0
239.	c2h2+oh=c2h+h2o			3.40E+07	2.0	14000.0
240.	c2h2+oh=ch3+co			4.84E-04	4.0	-2000.0
241.	c2h2+oh=ch2co+H			2.19E-04	4.5	-1000.0
242.	c2h2+oh=hccoh+H			5.06E+05	2.3	13500.0
243.	c2h2+O=CH2+co			1.98E+04	2.6	656.0
244.	c2h2+O=hcco+H			4.62E+04	2.6	656.0
245.	c2h2+ch3=c2h+ch4			1.80E+11	0.0	17290.0
246.	c2h2+H(+M)=c2h3(+M)			2.34E+15	-0.9	3064.0
	Low pressure limit:			2.25E+40	-7.27	6577.0
	TROE centering	0.500	675.0	675.0		
	h2o Enhanced by 5.000E+00					
	co Enhanced by 2.000E+00					
	co2 Enhanced by 3.000E+00					
	H2 Enhanced by 2.000E+00					
	ar Enhanced by 7.500E-01					
247.	c2h+H2=c2h2+H			1.51E+13	0.0	3100.0
248.	c2h+oh=hcco+H			2.00E+13	0.0	0.0
249.	c2h+O=co+CH			1.00E+13	0.0	0.0
250.	c2h+o2=co+hco			2.41E+12	0.0	0.0
251.	c2h4o=ch4+co			1.21E+13	0.0	57200.0
252.	c2h4o=ch3hco			6.00E+13	0.0	57200.0
253.	c2h4o=ch3+hco			4.90E+13	0.0	57200.0
254.	c2h4o+o2=c2h3o+ho2			4.00E+13	0.0	61500.0
255.	c2h4o+H=c2h3o+H2			2.00E+13	0.0	8300.0
256.	c2h4o+H=c2h3+h2o			5.00E+09	0.0	5000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

257.	c2h4o+H=c2h4+oh			9.51E+10	0.0	5000.0
258.	c2h4o+O=c2h3o+oh			1.91E+12	0.0	5250.0
259.	c2h4o+oh=c2h3o+h2o			4.79E+13	0.0	5955.0
260.	c2h4o+ho2=c2h3o+h2o2			4.00E+12	0.0	17000.0
261.	c2h4o+ch3=ch4+c2h3o			1.07E+12	0.0	11830.0
262.	c2h4o2h=c2h4o+oh			3.16E+11	0.0	19500.0
263.	c2h5o+H=ch3+ch2oh			1.00E+13	0.0	0.0
264.	c2h5o+H=ch3hco+H2			1.00E+13	0.0	0.0
265.	c2h5o+oh=ch3hco+h2o			4.82E+14	0.0	5017.0
266.	c2h5o=ch3hco+H			2.50E+14	0.0	23400.0
267.	c2h5o=ch3+ch2o			5.00E+13	0.0	21600.0
268.	c2h5o+ho2=ch3hco+h2o2			3.00E+11	0.0	0.0
269.	c2h5o+o2=ch3hco+ho2			3.60E+10	0.0	1093.0
270.	c2h5o2+ch3=c2h5o+ch3o			8.17E+12	0.0	-906.0
271.	c2h5o2=c2h4+ho2			3.57E+04	2.3	27955.0
272.	c2h5o2+ho2=c2h5o2h+o2			3.40E+11	0.0	-1300.0
273.	c2h5o2+ch2o=c2h5o2h+hco			1.99E+12	0.0	11660.0
274.	c2h4+c2h5o2=c2h3+c2h5o2h			2.23E+12	0.0	17190.0
275.	ch4+c2h5o2=ch3+c2h5o2h			1.81E+11	0.0	18480.0
276.	ch3oh+c2h5o2=ch2oh+c2h5o2h			1.81E+12	0.0	13710.0
277.	c2h6+c2h5o2=c2h5+c2h5o2h			1.32E+13	0.0	20470.0
278.	c2h4o+c2h5o2=c2h3o+c2h5o2h			1.13E+13	0.0	30430.0
279.	c3h6+c2h5o2=ac3h5+c2h5o2h			3.24E+11	0.0	14900.0
280.	c2h5o2+c3h8=c2h5o2h+nc3h7			1.70E+13	0.0	20460.0
281.	c2h5o2+c3h8=c2h5o2h+ic3h7			2.00E+12	0.0	17000.0
282.	c4h8+c2h5o2=Cc4h7-1+c2h5o2h			1.40E+12	0.0	14900.0
283.	c2h5o2+c2h5o2=c2h5o+c2h5o+o2			1.40E+16	-1.6	1860.0
284.	c2h5o2h=c2h5o+oh			4.00E+15	0.0	43000.0
285.	c2h5o2h+O=oh+c2h5o2			2.00E+13	0.0	4750.0
286.	c2h5o2h+oh=c2h5o2+h2o			2.00E+12	0.0	-370.0
287.	ch2hco+o2=ch2co+ho2			1.58E+10	0.0	0.0
288.	ch2hco+o2=ch2o+co+oh			2.51E+10	0.0	0.0
289.	ch2hco+o2=oh+chocho			2.51E+11	0.0	14640.0
290.	ch2hco+O=ch2o+hco			3.98E+13	0.0	0.0
291.	ch2hco+ho2=ch2o+hco+oh			1.00E+13	0.0	0.0
292.	ch2hco+oh=ch2co+h2o			2.00E+13	0.0	0.0
293.	H+ch2co(+M)=ch2hco(+M)			4.86E+11	0.4	-1755.0
	Low pressure limit:			1.01E+42	-7.63	3854.0
	TROE centering 0.465	201.0	1773.0	5333.0		
	h2o Enhanced by 6.000E+00					
	co Enhanced by 1.500E+00					
	co2 Enhanced by 2.000E+00					
	ch4 Enhanced by 2.000E+00					
	c2h5 Enhanced by 3.000E+00					
	H2 Enhanced by 2.000E+00					
	ar Enhanced by 7.500E-01					
294.	ch2co+M=CH2+co+M			3.60E+15	0.0	59270.0
	h2o Enhanced by 1.625E+01					
	co Enhanced by 1.875E+00					
	co2 Enhanced by 3.750E+00					
	ch4 Enhanced by 1.625E+01					
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01					
	H2 Enhanced by 2.500E+00					
	ar Enhanced by 7.500E-01					
295.	ch2co+o2=ch2o+co2			2.00E+13	0.0	61500.0
296.	ch2co+ho2=>ch2o+co+oh			6.00E+11	0.0	12738.0
297.	ch2co+O=CH2+co2			1.76E+12	0.0	1349.0
298.	ch2co+O=hcco+oh			1.00E+13	0.0	8000.0
299.	ch2co+oh=ch2oh+co			6.93E+12	0.0	0.0
300.	ch2co+oh=hco+ch2o			2.04E+11	0.0	0.0
301.	ch2co+oh=hcco+h2o			1.02E+11	0.0	0.0
302.	ch2co+oh=ch3+co2			3.10E+12	0.0	0.0
303.	ch2co+H=ch3+co			1.50E+04	2.8	673.0
304.	ch2co+H=hcco+H2			1.80E+14	0.0	8600.0
305.	ch2co+ch3=c2h5+co			6.00E+10	0.0	0.0
306.	ch2co+ch3=hcco+ch4			7.50E+12	0.0	13000.0
307.	ch2co+CH2=hcco+ch3			1.00E+12	0.0	0.0
308.	ch2co+CH2=c2h4+co			3.60E+13	0.0	11000.0
309.	chocho(+M)=ch2o+co(+M)			4.27E+12	0.0	50600.0
	Low pressure limit:			8.91E+16	0.0	49200.0
310.	chocho(+M)=co+co+H2(+M)			1.07E+14	0.0	55100.0
0	Low pressure limit: 0.257E+17 0.00E+00 0.38400E+05					
311.	chocho+oh=choco+h2o			1.00E+13	0.0	0.0
312.	chocho+O=choco+oh			7.24E+12	0.0	1970.0
313.	chocho+H=ch2o+hco			1.00E+12	0.0	0.0
314.	chocho+ho2=choco+h2o2			1.70E+12	0.0	10700.0
315.	chocho+ch3=choco+ch4			1.74E+12	0.0	8440.0
316.	chocho+o2=hco+co+ho2			6.30E+13	0.0	30000.0
317.	choco=hco+co			2.00E+07	0.0	0.0
318.	choco+o2=co+co+ho2			6.30E+13	0.0	30000.0
319.	c2h3o=ch2co+H			1.60E+13	0.0	35000.0
320.	c2h3o=ch3co			8.51E+14	0.0	14000.0
321.	c2h2oh=ch2co+H			5.00E+15	0.0	28000.0
322.	c2h2oh+H=ch2co+H2			2.00E+13	0.0	4000.0
323.	c2h2oh+O=ch2co+oh			2.00E+13	0.0	4000.0
324.	c2h2oh+oh=ch2co+h2o			1.00E+13	0.0	2000.0
325.	c2h2oh+o2=>hco+co2+H2			4.00E+12	0.0	-250.0
326.	hccoh+H=ch2co+H			1.00E+13	0.0	0.0
327.	hcco+M=CH+co+M			6.00E+15	0.0	58821.0
	h2o Enhanced by 1.625E+01					
	co Enhanced by 1.875E+00					
	co2 Enhanced by 3.750E+00					
	ch4 Enhanced by 1.625E+01					
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01					
	H2 Enhanced by 2.500E+00					
	ar Enhanced by 7.500E-01					
328.	hcco+oh=hco+co+H			1.00E+13	0.0	0.0
329.	hcco+O=co+co+H			1.93E+14	0.0	590.0
330.	hcco+H=sch2+co			1.50E+14	0.0	0.0
331.	hcco+o2=co2+co+H			1.40E+09	1.0	0.0
332.	hcco+CH2=c2h+ch2o			1.00E+13	0.0	2000.0
333.	hcco+CH2=c2h3+co			3.00E+13	0.0	0.0
334.	hcco+c2h2=c3h3+co			1.00E+11	0.0	3000.0
335.	hcco+CH=c2h2+co			5.00E+13	0.0	0.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

336.	hcco+hcco=c2h2+co+co			1.00E+13	0.0	0.0
337.	ch3hco=ch3+hco			2.45E+16	0.0	84128.0
338.	ch3hco+ho2=ch3co+h2o2			1.70E+12	0.0	10700.0
339.	ch3hco+oh=ch3co+h2o			2.35E+10	0.7	-1113.0
340.	ch3hco+O=ch3co+oh			5.85E+12	0.0	1808.0
341.	ch3hco+H=ch3co+H2			4.10E+09	1.2	2405.0
342.	ch3hco+o2=ch3co+ho2			3.00E+13	0.0	39150.0
343.	ch3hco+ch3=ch3co+ch4			1.70E+12	0.0	8440.0
344.	ch3hco+hco=ch3co+ch2o			7.80E+13	0.0	8440.0
345.	ch3hco+o2=ch2hco+ho2			1.00E+13	0.5	46000.0
346.	ch3co+M=ch3+co+M			8.64E+15	0.0	14400.0
304.	h2o Enhanced by 1.625E+01			1.80E+14	0.0	8600.0
305.	co Enhanced by 1.875E+00			6.00E+10	0.0	0.0
306.	co2 Enhanced by 3.750E+00			7.50E+12	0.0	13000.0
307.	ch4 Enhanced by 1.625E+01			1.00E+12	0.0	0.0
308.	c2h6 Enhanced by 1.625E+01			3.60E+13	0.0	11000.0
309.	H2 Enhanced by 2.500E+00			4.27E+12	0.0	50600.0
0	ar Enhanced by 7.500E-01			8.91E+16	0.0	49200.0
347.	c2o+o2=co+co+O			2.00E+13	0.0	0.0
348.	c2o+oh=co+co+H			2.00E+13	0.0	0.0
349.	c2o+O=co+co			5.00E+13	0.0	0.0
350.	c2o+H=CH+co			5.00E+13	0.0	0.0
351.	c2+o2=co+co			5.00E+13	0.0	0.0
352.	c2+oh=c2o+H			5.00E+13	0.0	0.0
353.	c2+H2=c2h+H			4.00E+05	2.4	1000.0
354.	c2h2+ch3=pc3h4+H			4.78E+03	2.4	12893.0
355.	c2h2+ch3=ac3h5			1.40E+04	2.2	16502.0
356.	c2h2+ch3=sc3h5			3.85E+56	-13.7	27892.0
357.	H+c2h5(+M)=c2h6(+M)			5.21E+17	-1.0	1580.0
	Low pressure limit:			1.99E+41	-7.08	6685.0
	TROE centering	0.842	125.0	2219.0	6882.0	
	h2o Enhanced by 1.625E+01					
	co Enhanced by 1.875E+00					
	co2 Enhanced by 3.750E+00					
	ch4 Enhanced by 1.625E+01					
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01					
358.	H+c2h(+M)=c2h2(+M)			1.00E+17	-1.0	0.0
0	Low pressure limit:			3.75E+33	-4.8	1900.0
0	TROE centering	0.646	132.0	1315.0	5566.0	
0	h2o Enhanced by 1.625E+01					
0	co Enhanced by 1.875E+00					
0	co2 Enhanced by 3.750E+00					
0	ch4 Enhanced by 1.625E+01					
0	c2h6 Enhanced by 1.625E+01					
359.	sc4h9(+M)=c3h6+ch3(+M)			2.27E+48	-10.5	45869.0
329.	Low pressure limit:			9.93E+51	-10.5	34989.0
330.	TROE centering	0.371	1.00E-15	574.0	2539.0	0.0	0.0
360.	c2h3+c2h2(+M)=ic4h5(+M)			1.00E+04	2.4	17900.0
332.	Low pressure limit:			2.60E+38	-7.41	7500.0
361.	ic4h5(+M)=c4h4+H(+M)			1.00E+14	0.0	50000.0
334.	Low pressure limit:			2.00E+15	0.0	42000.0
362.	nc4h5(+M)=c4h4+H(+M)			1.00E+14	0.0	37000.0
	Low pressure limit:			1.00E+14	0.0	30000.0
363.	ic4h3(+M)=c4h2+H(+M)			1.00E+14	0.0	55000.0
	Low pressure limit:			2.50E+15	0.0	48000.0
364.	nc4h3(+M)=c4h2+H(+M)			1.00E+14	0.0	36000.0
	Low pressure limit:			1.00E+14	0.0	30000.0
365.	CH2+c3h8=ch3+ic3h7			2.19E+12	0.0	6405.0
366.	CH2+c3h8=ch3+nc3h7			1.79E+12	0.0	6405.0
367.	ch3+c2h5(+M)=c3h8(+M)			4.90E+14	-0.5	0.0
	Low pressure limit:			6.80E+61	-13.42	6000.0
	TROE centering	0.842	125.0	2219.0	6882.0	
368.	c3h8+o2=nc3h7+ho2			4.00E+13	0.0	50872.0
369.	c3h8+o2=ic3h7+ho2			4.00E+13	0.0	47500.0
370.	c3h8+ho2=nc3h7+h2o2			4.76E+04	2.5	16494.0
371.	c3h8+ho2=ic3h7+h2o2			9.64E+03	2.6	13910.0
372.	c3h8+oh=nc3h7+h2o			3.16E+07	1.8	934.0
373.	c3h8+oh=ic3h7+h2o			7.08E+06	1.9	-159.0
374.	c3h8+O=nc3h7+oh			3.71E+06	2.4	5505.0
375.	c3h8+O=ic3h7+oh			5.49E+05	2.5	3140.0
376.	c3h8+H=nc3h7+H2			1.34E+06	2.5	6756.0
377.	c3h8+H=ic3h7+H2			1.01E+04	2.9	2931.0
378.	c3h8+ch3=nc3h7+ch4			3.00E+12	0.0	11710.0
379.	c3h8+ch3=ic3h7+ch4			8.07E+11	0.0	10110.0
380.	c3h8+c2h5=nc3h7+c2h6			3.16E+11	0.0	12300.0
381.	c3h8+c2h5=ic3h7+c2h6			5.01E+10	0.0	10400.0
382.	c3h8+c2h3=nc3h7+c2h4			6.00E+02	3.3	10502.0
383.	c3h8+c2h3=ic3h7+c2h4			1.00E+03	3.1	8829.0
384.	c3h8+ic3h7=nc3h7+c3h8			1.00E+11	0.0	12900.0
385.	c3h8+ac3h5=nc3h7+c3h6			7.94E+11	0.0	20500.0
386.	c3h8+ac3h5=ic3h7+c3h6			7.94E+11	0.0	16200.0
387.	c3h8+ch3o=nc3h7+ch3oh			3.18E+11	0.0	7050.0
388.	c3h8+ch3o=ic3h7+ch3oh			7.20E+10	0.0	4470.0
389.	ic3h7=c2h4+ch3			1.14E+11	0.0	31110.0
390.	nc3h7=c2h4+ch3			1.50E+13	0.0	30404.0
391.	c3h6+H(+M)=nc3h7(+M)			1.33E+13	0.0	3260.7
	Low pressure limit:			6.26E+38	-6.66	700.0
	TROE centering	1.0	1000.0	1310.0	48097.0	
	h2o Enhanced by 1.625E+01					
	co Enhanced by 1.875E+00					
	co2 Enhanced by 3.750E+00					
	ch4 Enhanced by 1.625E+01					
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01					
392.	c3h6+H(+M)=ic3h7(+M)			5.70E+09	1.2	874.0
	Low pressure limit:			1.64E+54	-11.1	9364.0
	TROE centering	1.0	1.00E-15	260.0	3000.0	
	h2o Enhanced by 1.625E+01					
	co Enhanced by 1.875E+00					
	co2 Enhanced by 3.750E+00					
	ch4 Enhanced by 1.625E+01					
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01					
393.	nc3h7+o2=c3h6+ho2			1.00E+12	0.0	5020.0
394.	ic3h7+o2=c3h6+ho2			2.75E+10	0.0	-2151.0
395.	oh+ic3h7=nc3h7oh			5.90E+12	0.0	0.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

396.	ho2+ic3h7=nc3h7o2h	4.80E+12	0.0	0.0
397.	nc3h7+o2=nc3h7o2	4.82E+36	-8.2	5167.0
398.	ic3h7+o2=ic3h7o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
399.	nc3h7+H=c2h5+ch3	1.00E+14	0.0	0.0
400.	ic3h7+H=c2h5+ch3	5.00E+13	0.0	0.0
401.	ic3h7+H=c3h6+H2	3.61E+12	0.0	0.0
402.	ic3h7+O=aceton+H	4.82E+13	0.0	0.0
403.	ic3h7+O=ch3hco+ch3	4.82E+13	0.0	0.0
404.	ch3o2+nc3h7=ch3o+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
405.	ic3h7o2+nc3h7=ic3h7o+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
406.	nc3h7o2+nc3h7=nc3h7o+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
407.	nc3h7+ho2=nc3h7o+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
408.	ch3o2+ic3h7=ch3o+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
409.	ic3h7o2+ic3h7=ic3h7o+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
410.	nc3h7o2+ic3h7=nc3h7o+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
411.	ic3h7+ho2=ic3h7o+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
412.	nc3h7o=ethco+H	2.51E+14	0.0	23400.0
413.	nc3h7o=c2h5+ch2o	1.00E+15	0.0	21600.0
414.	ic3h7o=aceton+H	2.00E+14	0.0	21500.0
415.	ic3h7o=ch3+ch3hco	3.98E+14	0.0	17200.0
416.	ic3h7o+o2=aceton+ho2	9.09E+09	0.0	390.0
417.	ic3h7o2+acrol=c2h3co+ic3h7o2h	2.80E+12	0.0	13600.0
418.	ic3h7o2+c2h4=c2h3+ic3h7o2h	1.13E+13	0.0	30430.0
419.	ic3h7o2+ethco=ic3h7o2h+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
420.	ic3h7o2+c2h6=ic3h7o2h+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
421.	ic3h7o2+ch2o=ic3h7o2h+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
422.	ic3h7o2+ch3hco=ic3h7o2h+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
423.	ic3h7o2+ch4=ch3+ic3h7o2h	1.12E+13	0.0	24640.0
424.	ic3h7o2+H2=H+ic3h7o2h	3.01E+13	0.0	26030.0
425.	ic3h7o2+ch3oh=ch2oh+ic3h7o2h	6.30E+12	0.0	19360.0
426.	ic3h7o2+ho2=ic3h7o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
427.	ic3h7o2+c2h5o2=ic3h7o+c2h5o+o2	5.00E+10	0.0	0.0
428.	ic3h7o2+ic3h7o2=o2+ic3h7o+ic3h7o	5.00E+10	0.0	0.0
429.	ic3h7o2+nc3h7o2=ic3h7o+nc3h7o+o2	5.00E+10	0.0	0.0
430.	ic3h7o2+ch3o2=ic3h7o+ch3o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
431.	ic3h7o2+ho2=ic3h7o+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
432.	ic3h7o2+c2h5=ic3h7o+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
433.	ic3h7o2+ac3h5=ic3h7o+c3h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
434.	ic3h7o2+ch3=ic3h7o+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
435.	ic3h7o2=c3h6ooh2-1	1.78E+13	0.0	29700.0
436.	nc3h7o2+acrol=c2h3co+nc3h7o2h	2.80E+12	0.0	13600.0
437.	nc3h7o2+c2h4=c2h3+nc3h7o2h	1.13E+13	0.0	30430.0
438.	nc3h7o2+ethco=nc3h7o2h+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
439.	nc3h7o2+c2h6=nc3h7o2h+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
440.	nc3h7o2+ch2o=nc3h7o2h+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
441.	nc3h7o2+ch3hco=nc3h7o2h+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
442.	nc3h7o2+ch4=ch3+nc3h7o2h	1.12E+13	0.0	24640.0
443.	nc3h7o2+H2=H+nc3h7o2h	3.01E+13	0.0	26030.0
444.	nc3h7o2+ch3oh=ch2oh+nc3h7o2h	6.30E+12	0.0	19360.0
445.	nc3h7o2+ho2=nc3h7o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
446.	nc3h7o2+c2h5o2=nc3h7o+c2h5o+o2	5.00E+10	0.0	0.0
447.	nc3h7o2+nc3h7o2=o2+nc3h7o+nc3h7o	5.00E+10	0.0	0.0
448.	nc3h7o2+ch3o2=nc3h7o+ch3o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
449.	nc3h7o2+ho2=nc3h7o+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
450.	nc3h7o2+c2h5=nc3h7o+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
451.	nc3h7o2+ac3h5=nc3h7o+c3h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
452.	nc3h7o2+ch3=nc3h7o+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
453.	nc3h7o2=c3h6ooh1-3	7.42E+11	0.0	23900.0
454.	nc3h7o2=c3h6ooh1-2	5.95E+12	0.0	27900.0
455.	nc3h7o2h=nc3h7o+oh	8.06E+19	-1.5	47000.0
456.	ic3h7o2h=ic3h7o+oh	8.42E+19	-1.4	46080.0
457.	c3h6ooh1-2=c3h6o+oh	1.25E+15	-1.2	17580.0
458.	c3h6ooh1-3=c3h6o1-3+oh	4.31E+15	-1.3	18240.0
459.	c3h6ooh2-1=c3h6o+oh	3.46E+16	-1.6	18870.0
460.	c3h6ooh1-2=c3h6+ho2	5.50E+14	-0.8	15260.0
461.	c3h6ooh2-1=c3h6+ho2	2.44E+19	-2.1	18230.0
462.	c3h6ooh1-3=oh+ch2o+c2h4	1.16E+17	-1.1	32570.0
463.	c3h6ooh1-2+o2=c3h6ooh1-2o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
464.	c3h6ooh1-3+o2=c3h6ooh1-3o2	4.82E+36	-8.2	5167.0
465.	c3h6ooh2-1+o2=c3h6ooh2-1o2	4.82E+36	-8.2	5167.0
466.	c3h6ooh1-2o2=c3ket12+oh	2.96E+12	0.0	26700.0
467.	c3h6ooh1-3o2=c3ket13+oh	2.47E+11	0.0	20900.0
468.	c3h6ooh2-1o2=c3ket21+oh	1.48E+12	0.0	24900.0
469.	c3ket12=ch3hco+hco+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
470.	c3ket13=ch2o+ch2hco+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
471.	c3ket21=>ch2o+ch3co+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
472.	c3h6o+H=>H2+ch2co+ch3	2.70E+07	2.0	5000.0
473.	c3h6o+oh=>h2o+ch2co+ch3	7.80E+06	2.0	-765.0
474.	c3h6o+ho2=>h2o2+ch2co+ch3	1.20E+12	0.0	15500.0
475.	c3h6o+ch3=>ch4+ch2co+ch3	6.00E+11	0.0	9600.0
476.	c3h6o+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3	6.00E+11	0.0	9600.0
477.	c3h6o+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3	6.00E+11	0.0	11000.0
478.	c3h6o+O=>oh+hco+c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
479.	c3h6o1-3+H=>H2+hco+c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
480.	c3h6o1-3+oh=>h2o+hco+c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
481.	c3h6o1-3+ho2=>h2o2+hco+c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
482.	c3h6o1-3+ch3=>ch4+hco+c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
483.	c3h6o1-3+ch3o2=>ch3o2h+hco+c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
484.	c3h6o1-3+c2h5=>c2h6+hco+c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
485.	c3h6o1-3+O=>oh+hco+c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
486.	c3h6o=c2h5+hco	2.45E+13	0.0	58500.0
487.	c3h6o=ethco	1.82E+14	0.0	58500.0
488.	c3h6o=ch3+ch3co	4.54E+13	0.0	59900.0
489.	c3h6o=ch3+ch2hco	2.45E+13	0.0	58820.0
490.	c3h6o=ch3+c2h3o	8.00E+15	0.0	92010.0
491.	c3h6o1-3+H=ch2ch2hco+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
492.	c3h6o1-3+oh=ch2ch2hco+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
493.	c3h6o1-3+ho2=ch2ch2hco+h2o2	1.20E+12	0.0	15500.0
494.	c3h6o1-3+ch3=ch2ch2hco+ch4	6.00E+11	0.0	9600.0
495.	c3h6o1-3=ethco	1.82E+14	0.0	58500.0
496.	ac3h5+H(+M)=c3h6(+M)	3.70E+14	0.0	0.0
	Low pressure limit:	1.33E+60	-12.0	5967.8
	TROE centering 0.020 1096.6 1096.6 6859.5			
	h2o Enhanced by 1.625E+01			

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

	co Enhanced by 1.875E+00			
	co2 Enhanced by 3.750E+00			
	ch4 Enhanced by 1.625E+01			
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01			
497.	c3h6=sc3h5+H	7.59E+14	0.0	101300.0
498.	c3h6=tc3h5+H	1.45E+15	0.0	98060.0
499.	c3h6=c2h3+ch3	1.10E+21	-1.2	97720.0
500.	c3h6=ch4+c2h2	3.50E+12	0.0	70000.0
501.	c3h6+o2=ac3h5+ho2	1.95E+12	0.0	39000.0
502.	c3h6+o2=sc3h5+ho2	1.40E+13	0.0	60200.0
503.	c3h6+o2=tc3h5+ho2	7.00E+12	0.0	60200.0
504.	c3h6+ho2=c3h6o+oh	1.02E+12	0.0	14964.0
505.	c3h6+ho2=ac3h5+h2o2	1.50E+11	0.0	14190.0
506.	c3h6+ho2=sc3h5+h2o2	7.50E+09	0.0	12570.0
507.	c3h6+ho2=tc3h5+h2o2	3.00E+09	0.0	9930.0
508.	c3h6+oh=ac3h5+h2o	7.70E+05	2.2	622.0
509.	c3h6+oh=sc3h5+h2o	1.01E+13	0.0	5960.0
510.	c3h6+oh=tc3h5+h2o	1.11E+06	2.0	1450.0
511.	c3h6+O=c2h5+hco	4.69E+07	1.6	-628.0
512.	c3h6+O=ch3+ch2hco	3.90E+07	1.6	-628.0
513.	c3h6+O=c2h4+ch2o	7.02E+07	1.6	-628.0
514.	c3h6+O=ac3h5+oh	1.75E+11	0.7	5884.0
515.	c3h6+O=sc3h5+oh	1.20E+11	0.7	8960.0
516.	c3h6+O=tc3h5+oh	6.00E+10	0.7	7633.0
517.	c3h6+H=ac3h5+H2	6.46E+12	0.0	4445.0
518.	c3h6+H=sc3h5+H2	3.46E+14	0.0	17422.0
519.	c3h6+H=tc3h5+H2	1.67E+14	0.0	14818.0
520.	c3h6+ch3=ac3h5+ch4	1.60E+11	0.0	8800.0
521.	c3h6+ch3=sc3h5+ch4	3.30E+11	0.0	10110.0
522.	c3h6+ch3=tc3h5+ch4	5.00E+10	0.0	8030.0
523.	c3h6+c2h5=ac3h5+c2h6	1.00E+11	0.0	9800.0
524.	c3h6+c2h3=c4h6+ch3	7.20E+11	0.0	5008.0
525.	c3h6+oh=>ch3+ch3hco	1.00E+12	0.0	0.0
526.	c3h6+oh=>ch2o+c2h5	1.00E+12	0.0	0.0
527.	c3h6+oh=c3h6oh	9.93E+11	0.0	-960.0
528.	c3h6oh+o2=o2c3h6oh	1.20E+11	0.0	-1100.0
529.	o2c3h6oh=ch3hco+ch2o+oh	1.25E+10	0.0	18900.0
530.	ac3h5+ho2=c3h5o+oh	9.00E+12	0.0	0.0
531.	ac3h5+H=ac3h4+H2	6.03E+12	0.0	0.0
532.	ac3h5+ch3=ac3h4+ch4	1.00E+11	0.0	0.0
533.	ac3h5+CH2=c4h6+H	3.00E+13	0.0	0.0
534.	ac3h5+c2h5=ac3h4+c2h6	4.00E+11	0.0	0.0
535.	ac3h5+c2h3=ac3h4+c2h4	1.00E+12	0.0	0.0
536.	sc3h5=pc3h4+H	5.62E+12	0.0	43500.0
537.	sc3h5+o2=ch3hco+hco	4.33E+12	0.0	0.0
538.	sc3h5+ho2=>ch2co+ch3+oh	4.50E+12	0.0	0.0
539.	sc3h5+H=ac3h4+H2	3.33E+12	0.0	0.0
540.	sc3h5+H=pc3h4+H2	4.00E+13	0.0	0.0
541.	sc3h5+O=>ch2co+ch3	1.81E+14	0.0	0.0
542.	sc3h5+ch3=ac3h4+ch4	1.00E+11	0.0	0.0
543.	sc3h5+c2h5=ac3h4+c2h6	1.00E+11	0.0	0.0
544.	sc3h5+c2h3=ac3h4+c2h4	1.00E+11	0.0	0.0
545.	tc3h5=ac3h5	2.50E+12	0.0	47000.0
546.	tc3h5+o2=ch3co+ch2o	5.01E+12	0.0	19000.0
547.	tc3h5+O=>ch2co+ch3	1.81E+14	0.0	0.0
548.	tc3h5+H=pc3h4+H2	1.00E+13	0.0	0.0
549.	tc3h5+ch3=ac3h4+ch4	1.00E+11	0.0	0.0
550.	tc3h5+c2h5=ac3h4+c2h6	1.00E+11	0.0	0.0
551.	tc3h5+c2h3=ac3h4+c2h4	1.00E+11	0.0	0.0
552.	ac3h4+M=c3h3+H+M	2.00E+18	0.0	80000.0
501.	h2o Enhanced by 1.625E+01	1.95E+12	0.0	39000.0
553.	ac3h4=pc3h4	3.10E+65	-15.1	93814.0
	Declared duplicate reaction...	7.00E+12	0.0	60200.0
554.	ac3h4=pc3h4	1.20E+15	0.0	92400.0
	Declared duplicate reaction...	1.50E+11	0.0	14190.0
555.	ac3h4+o2=c3h3+ho2	4.00E+13	0.0	61500.0
556.	ac3h4+ho2=>c3h4o2h	3.00E+11	0.0	8000.0
557.	ac3h4+ho2=c3h3+h2o2	1.80E+13	0.0	19000.0
558.	ac3h4+ho2=>ch2co+CH2+oh	5.00E+11	0.0	19000.0
559.	ac3h4+ho2=>acrol+oh	5.00E+11	0.0	19000.0
560.	ac3h4+ho2=>c2h2+ch2o+oh	5.00E+11	0.0	19000.0
561.	ac3h4+oh=c3h3+h2o	3.62E+12	0.0	4170.0
562.	ac3h4+oh=ch2co+ch3	1.00E+12	0.0	-393.0
563.	ac3h4+oh=hco+c2h4	1.25E+11	0.0	-393.0
564.	ac3h4+oh=c2h5+co	1.88E+11	0.0	-393.0
565.	ac3h4+oh=acrol+H	3.75E+11	0.0	-393.0
566.	ac3h4+O=c2h4+co	1.12E-02	4.6	-4243.0
567.	ac3h4+O=c2h3+hco	5.00E-04	4.6	-4243.0
568.	ac3h4+O=ch2co+CH2	1.00E-03	4.6	-4243.0
569.	ac3h4+O=c2h2+ch2o	2.50E-03	4.6	-4243.0
570.	ac3h4+H=ac3h5	1.20E+12	0.0	2700.0
571.	ac3h4+H=sc3h5	8.00E+11	0.0	2000.0
572.	ac3h4+H=tc3h5	8.50E+12	0.0	2000.0
573.	ac3h4+H=c3h3+H2	1.00E+14	0.0	15009.0
574.	ac3h4+ch3=c3h3+ch4	1.33E+12	0.0	7700.0
575.	ac3h4+ac3h5=c3h3+c3h6	9.00E+11	0.0	7700.0
576.	c3h4o2h=>ac3h4+ho2	3.16E+11	0.0	19500.0
577.	c3h4o2h=>c3h4o+oh	3.16E+11	0.0	19500.0
578.	c3h4o=>acrol	2.45E+14	0.0	58485.0
579.	c3h4o+o2=>c3h3o+ho2	4.00E+13	0.0	61500.0
580.	c3h4o+ho2=>ch2co+ch2o+oh	1.00E+12	0.0	14340.0
581.	c3h4o+ho2=>c3h3o+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
582.	c3h4o+oh=>c3h3o+h2o	4.79E+13	0.0	5955.0
583.	c3h4o+H=>c3h3o+H2	2.00E+13	0.0	8300.0
584.	c3h3o=>c2h3co	8.51E+14	0.0	14000.0
585.	c3h3o+o2=>hcco+hco+oh	5.01E+12	0.0	19192.0
586.	pc3h4+M=c3h3+H+M	3.39E+22	-2.0	92370.0
538.	h2o Enhanced by 1.625E+01	4.50E+12	0.0	0.0
587.	pc3h4=c2h+ch3	4.20E+16	0.0	100000.0
588.	pc3h4+o2=c3h3+ho2	2.50E+12	0.0	51000.0
589.	pc3h4+o2=>hcco+oh+CH2	1.00E+07	1.5	30100.0
590.	pc3h4+ho2=>c2h4+co+oh	6.09E+09	0.0	7948.0
591.	pc3h4+ho2=ch3co+ch2o	3.00E+12	0.0	16000.0
592.	pc3h4+ho2=ch3hco+hco	4.50E+12	0.0	16000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

593.	pc3h4+ho2=c3h3+h2o2				5.00E+11	0.0	19000.0
594.	pc3h4+oh=c3h3+h2o				6.50E+02	3.0	200.0
595.	pc3h4+oh=ch2co+ch3				2.00E-04	4.5	-1000.0
596.	pc3h4+oh=hco+c2h4				1.00E-04	4.5	-1000.0
597.	pc3h4+oh=ch2o+c2h3				1.00E-04	4.5	-1000.0
598.	pc3h4+oh=acrol+H				1.00E-04	4.5	-1000.0
599.	pc3h4+O=ch2co+CH2				6.40E+12	0.0	2100.0
600.	pc3h4+O=c2h3+hco				3.20E+12	0.0	2100.0
601.	pc3h4+O=hcco+ch3				9.18E+12	0.0	2100.0
602.	pc3h4+O=ch2o+c2h2				3.20E+11	0.0	2100.0
603.	pc3h4+O=>hcco+CH2+H				3.20E+11	0.0	2010.0
604.	pc3h4+H=tc3h5				1.30E+13	0.0	1999.0
605.	pc3h4+H=c3h3+H2				2.00E+14	0.0	15000.0
606.	pc3h4+ch3=c3h3+ch4				4.00E+11	0.0	7700.0
607.	pc3h4+c2h3=c3h3+c2h4				1.00E+11	0.0	7700.0
608.	pc3h4+c2h=c3h3+c2h2				4.20E+16	0.0	100000.0
609.	pc3h4+oh(+M)=>c3h4oh(+M)				2.29E+13	0.0	1808.0
	Low pressure limit:				7.44E+26	-3.1	1808.0
	TROE centering	0.170	180.0	50000.0	12772.0		
610.	c3h4oh=>ch2co+ch3				3.00E+15	0.0	28000.0
611.	c3h4oh=>hco+c2h4				5.00E+14	0.0	28000.0
612.	c3h4oh=>ch2o+c2h3				1.00E+15	0.0	28000.0
613.	c3h4oh=>acrol+H				5.00E+14	0.0	28000.0
614.	c3h3+o2=ch2co+hco				3.01E+10	0.0	2870.0
615.	c3h3+ho2=c3h2+h2o2				2.00E+12	0.0	0.0
616.	c3h3+oh=c3h2+h2o				5.00E+12	0.0	0.0
617.	c3h3+oh=hcco+ch3				5.00E+12	0.0	0.0
618.	c3h3+O=>c2h2+hco				1.38E+14	0.0	0.0
619.	c3h3+O=c2h3+co				4.61E+13	0.0	0.0
620.	c3h3+O=c2h+ch2o				4.61E+13	0.0	0.0
621.	c3h3+O=>c2h2+co+H				4.61E+13	0.0	0.0
622.	c3h3+H=c3h2+H2				5.00E+13	0.0	3000.0
623.	c3h3+CH=ic4h3+H				7.00E+13	0.0	0.0
624.	c3h3+CH=nc4h3+H				7.00E+13	0.0	0.0
625.	c3h3+CH2=c4h4+H				4.00E+13	0.0	0.0
626.	c3h3+ch3=c4h6				3.33E+12	0.0	0.0
627.	CH+c2h2=c3h2+H				1.00E+14	0.0	0.0
628.	c3h2+o2=hcco+hco				3.00E+10	0.0	2870.0
629.	c3h2+oh=c2h2+hco				5.00E+13	0.0	0.0
630.	c3h2+CH2=ic4h3+H				3.00E+13	0.0	0.0
631.	c3h5o=c2h3+ch2o				3.39E+14	0.0	22658.0
632.	c3h5o=acrol+H				1.10E+13	0.0	18451.0
633.	ethco+H=H2+c2h5co				4.00E+13	0.0	4200.0
634.	ethco+oh=h2o+c2h5co				4.20E+12	0.0	500.0
635.	ethco+ho2=h2o2+c2h5co				1.00E+12	0.0	10000.0
636.	ethco+ch3=ch4+c2h5co				2.00E-06	5.6	2500.0
637.	ethco+c2h5=c2h6+c2h5co				1.30E+12	0.0	8500.0
638.	ethco+o2=c2h5co+ho2				1.00E+13	0.0	40700.0
639.	c2h5co=>co+c2h5				2.00E+13	0.0	28700.0
640.	c2h5co+ho2=>co2+oh+c2h5				2.00E+13	0.0	0.0
641.	acrol+H=H2+c2h3co				4.00E+13	0.0	4200.0
642.	acrol+oh=h2o+c2h3co				4.20E+12	0.0	500.0
643.	acrol+ho2=h2o2+c2h3co				1.00E+12	0.0	10000.0
644.	acrol+ch3=ch4+c2h3co				2.00E-06	5.6	2500.0
645.	acrol+c2h5=c2h6+c2h3co				1.30E+12	0.0	8500.0
646.	acrol=c2h3+hco				2.45E+16	0.0	84128.0
647.	acrol+O=c2h3co+oh				5.01E+12	0.0	1790.0
648.	acrol+c2h3=c2h4+c2h3co				1.74E+12	0.0	8440.0
649.	acrol+ac3h5=c3h6+c2h3co				1.00E+12	0.0	8000.0
650.	c2h3co+M=>c2h3+co+M				8.60E+15	0.0	23000.0
	h2o Enhanced by 1.625E+01						
	co Enhanced by 1.875E+00						
	co2 Enhanced by 3.750E+00						
	ch4 Enhanced by 1.625E+01						
	c2h6 Enhanced by 1.625E+01						
651.	aceton+H=H2+ch2coch3				2.70E+07	2.0	5000.0
652.	aceton+oh=h2o+ch2coch3				7.80E+06	2.0	-765.0
653.	aceton+ho2=h2o2+ch2coch3				1.20E+12	0.0	15500.0
654.	aceton+ch3=ch4+ch2coch3				6.00E+11	0.0	9600.0
655.	aceton+ch3o2=ch3o2h+ch2coch3				6.00E+11	0.0	9600.0
656.	aceton+c2h5=c2h6+ch2coch3				6.00E+11	0.0	11000.0
657.	ch2coch3=ch2co+ch3				1.00E+15	0.0	31000.0
658.	ch3coch2o2=ch2coch3+o2				9.30E+13	-1.1	27450.0
612.	Reverse Arrhenius coefficients:				1.20E+11	0.0	-1100.0
659.	aceton+ch3coch2o2=ch2coch3+ch3coch2o2h				1.00E+11	0.0	5000.0
614.	Reverse Arrhenius coefficients:				1.99E+10	0.0	10000.0
660.	ch2o+ch3coch2o2=hco+ch3coch2o2h				1.29E+11	0.0	9000.0
616.	Reverse Arrhenius coefficients:				2.51E+10	0.0	10100.0
661.	ho2+ch3coch2o2=ch3coch2o2h+o2				1.00E+12	0.0	0.0
662.	ch3coch2o2h=ch3coch2o+oh				1.00E+16	0.0	43000.0
619.	Reverse Arrhenius coefficients:				2.04E+09	1.6	-4375.0
663.	ch3coch2o=ch3co+ch2o				8.71E+16	-1.2	13760.0
621.	Reverse Arrhenius coefficients:				1.00E+11	0.0	11900.0
664.	c2h4+hco=ch2ch2hco				1.50E+11	0.0	8300.0
665.	ch2ch2hco+o2=qjch2ch2hco				4.82E+36	-8.2	5167.0
666.	qjch2ch2hco=qch2chhco				2.68E+12	0.0	32500.0
667.	qjch2ch2hco=qch2ch2co				4.60E+11	0.0	20000.0
668.	qch2ch2co+o2=qch2ch2co3				1.84E+45	-11.1	6538.0
669.	qch2ch2co3=2oh+co2+ch2hco				4.60E+11	0.0	23000.0
670.	qch2chhco=ho2+acrol				8.50E+12	0.0	26000.0
671.	qch2chhco+o2=qqjch2chhco				4.82E+36	-8.2	5167.0
672.	qqjch2chhco=2oh+hco+chocho				2.68E+12	0.0	30500.0
673.	ch2ch2hco+o2=acrol+ho2				1.90E+12	0.0	5000.0
674.	ch3cocho+oh=ch3coco+h2o				2.30E+10	0.7	-1100.0
675.	ch3cocho+H=ch3coco+H2				4.10E+09	1.2	2405.0
676.	ch3cocho+ho2=ch3coco+h2o2				3.00E+12	0.0	12000.0
677.	ch3coco=ch3co+co				1.40E+14	0.0	6692.0
678.	ch3coco+o2=co2+co2+ch3				3.00E+10	0.0	2870.0
679.	ch3coco+ho2=oh+co2+ch3co				2.00E+13	0.0	0.0
680.	ch2co+hco=ch2cohco				2.00E+11	0.0	7800.0
681.	hcoch2hco+oh=hcoch2co+h2o				4.60E+10	0.7	-1100.0
682.	hcoch2hco+H=hcoch2co+H2				8.20E+09	1.2	2405.0
683.	hcoch2hco+ho2=hcoch2co+h2o2				6.00E+12	0.0	12000.0
684.	hcoch2hco+ch3=hcoch2co+ch4				1.52E+01	3.4	3740.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

685.	hcoch2hco+o2=hcoch2co+ho2	6.00E+13	0.0	39200.0
686.	hcoch2co=ch2hco+co	1.83E+15	-0.7	12910.0
687.	c4h10=c2h5+c2h5	2.00E+16	0.0	81300.0
688.	c4h10=ch3+nc3h7	1.00E+17	0.0	85400.0
689.	c4h10=pc4h9+H	1.58E+16	0.0	98000.0
690.	c4h10=sc4h9+H	1.00E+16	0.0	95000.0
691.	c4h10+o2=pc4h9+ho2	2.51E+13	0.0	49000.0
692.	c4h10+H=pc4h9+H2	5.63E+07	2.0	7700.0
693.	c4h10+O=pc4h9+oh	4.89E+06	2.4	5505.0
694.	c4h10+oh=pc4h9+h2o	4.14E+07	1.7	753.0
695.	c4h10+ho2=pc4h9+h2o2	1.70E+13	0.0	20460.0
696.	c4h10+ch3=pc4h9+ch4	2.19E+11	0.0	11400.0
697.	c4h10+c2h3=pc4h9+c2h4	1.00E+12	0.0	18000.0
698.	c4h10+c2h5=pc4h9+c2h6	1.00E+11	0.0	13400.0
699.	c4h10+ac3h5=pc4h9+c3h6	7.94E+11	0.0	20500.0
700.	c4h10+ch3o=pc4h9+ch3oh	3.00E+11	0.0	7000.0
701.	c4h10+o2=sc4h9+ho2	3.98E+13	0.0	47600.0
702.	c4h10+H=sc4h9+H2	4.78E+06	2.5	7369.0
703.	c4h10+O=sc4h9+oh	4.28E+05	2.6	2583.0
704.	c4h10+oh=sc4h9+h2o	7.23E+07	1.6	-246.0
705.	c4h10+ho2=sc4h9+h2o2	4.00E+12	0.0	18150.0
706.	c4h10+ch3=sc4h9+ch4	2.19E+11	0.0	9600.0
707.	c4h10+c2h3=sc4h9+c2h4	7.94E+11	0.0	16800.0
708.	c4h10+c2h5=sc4h9+c2h6	1.00E+11	0.0	10400.0
709.	c4h10+ac3h5=sc4h9+c3h6	3.16E+11	0.0	16400.0
710.	c4h10+ch3o=sc4h9+ch3oh	6.00E+11	0.0	7000.0
711.	pc4h9=c2h5+c2h4	2.50E+13	0.0	28824.0
712.	sc4h9=ch3+c3h6	2.00E+13	0.0	31000.0
713.	pc4h9=c3h6+ch3	1.26E+12	0.0	27026.0
714.	pc4h9=c4h8+H	1.26E+13	0.0	38600.0
715.	sc4h9=t2c4h8+H	4.57E+12	0.0	34000.0
716.	sc4h9=c2c4h8+H	4.17E+12	0.0	34780.0
717.	pc4h9+o2=c4h8+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
718.	sc4h9+o2=c4h8+ho2	7.59E+09	0.0	-2000.0
719.	sc4h9+o2=t2c4h8+ho2	9.00E+09	0.0	-2000.0
720.	sc4h9+o2=c2c4h8+ho2	9.00E+09	0.0	-2000.0
721.	pc4h9=sc4h9	1.39E+09	1.0	33760.0
722.	pc4h9+ho2=c4h8+h2o2	2.41E+13	0.0	0.0
723.	pc4h9+oh=c4h8+h2o	2.40E+13	0.0	0.0
724.	pc4h9+H=c4h8+H2	1.25E+13	0.0	0.0
725.	pc4h9+ch3=c4h8+ch4	2.00E+12	0.0	0.0
726.	pc4h9+c2h5=c4h8+c2h6	1.60E+12	0.0	0.0
727.	pc4h9+ac3h5=c4h8+c3h6	1.00E+12	0.0	0.0
728.	sc4h9+ho2=c4h8+h2o2	2.40E+13	0.0	0.0
729.	sc4h9+ho2=t2c4h8+h2o2	2.40E+13	0.0	0.0
730.	sc4h9+ho2=c2c4h8+h2o2	2.40E+13	0.0	0.0
731.	sc4h9+oh=c4h8+h2o	2.40E+13	0.0	0.0
732.	sc4h9+oh=t2c4h8+h2o	2.40E+13	0.0	0.0
733.	sc4h9+oh=c2c4h8+h2o	2.40E+13	0.0	0.0
734.	sc4h9+H=c4h8+H2	3.33E+13	0.0	0.0
735.	sc4h9+H=t2c4h8+H2	5.00E+13	0.0	0.0
736.	sc4h9+H=c2c4h8+H2	5.00E+13	0.0	0.0
737.	sc4h9+ch3=c4h8+ch4	8.00E+11	0.0	0.0
738.	sc4h9+ch3=t2c4h8+ch4	1.00E+12	0.0	0.0
739.	sc4h9+ch3=c2c4h8+ch4	1.00E+12	0.0	0.0
740.	pc4h9+o2=c4h9qjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
741.	sc4h9+o2=c4h9qjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
742.	c4h9qjA=c4h8rBqA	3.30E+09	1.0	32500.0
743.	c4h9qjA=c4h8rCqA	5.70E+08	1.0	25000.0
744.	c4h9qjA=c4h8rDqA	1.50E+08	1.0	25000.0
745.	c4h9qjB=c4h8rDqB	8.60E+08	1.0	28000.0
746.	c4h9qjB=c4h8rAqB	5.00E+09	1.0	35500.0
747.	c4h9qjB=c4h8rCqB	3.30E+09	1.0	32500.0
748.	c4h9qjA+ho2=nc4h9o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
749.	c4h9qjB+ho2=nc4h9o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
750.	c4h8rDqA=c4h8rAqA	5.70E+08	1.0	15300.0
751.	c4h8rDqB=c4h8rAqB	8.60E+08	1.0	19800.0
752.	c4h8rAqA+o2=c4h8qjAqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
753.	c4h8rBqA+o2=c4h8qjBqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
754.	c4h8rCqA+o2=c4h8qjCqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
755.	c4h8rDqA+o2=c4h8qjDqA	4.82E+36	-8.2	5167.0
756.	c4h8rAqB+o2=c4h8qjAqB	4.82E+36	-8.2	5167.0
757.	c4h8rCqB+o2=c4h8qjCqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
758.	c4h8rDqB+o2=c4h8qjDqB	4.82E+36	-8.2	5167.0
759.	c4h8rCqA=>oh+ch2o+c3h6	5.00E+13	0.0	25500.0
760.	c4h8rDqB=>oh+ch3hco+c2h4	5.00E+13	0.0	25500.0
761.	c4h8rAqA=oh+nc3h7hco	1.00E+09	0.0	7500.0
762.	c4h8rBqA=oh+c4h8o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
763.	c4h8rCqA=oh+c4h8o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
764.	c4h8rDqA=oh+c4h8o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
765.	c4h8rAqB=oh+c4h8o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
766.	c4h8rCqB=oh+c4h8o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
767.	c4h8rDqB=oh+c4h8o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
768.	c4h8rBqA=ho2+c4h8	8.50E+12	0.0	26000.0
769.	c4h8rAqB=ho2+c4h8	8.50E+12	0.0	26000.0
770.	c4h8rCqB=ho2+c4h8	8.50E+12	0.0	26000.0
771.	c4h8qjBqA=oh+c4h7oAqB	2.68E+12	0.0	30500.0
772.	c4h8qjCqA=oh+c4h7oAqC	4.60E+11	0.0	23000.0
773.	c4h8qjDqA=oh+c4h7oAqD	7.90E+10	0.0	20000.0
774.	c4h8qjAqB=oh+c4h7oBqA	1.34E+12	0.0	27500.0
775.	c4h8qjCqB=oh+c4h7oBqC	1.34E+12	0.0	27500.0
776.	c4h8qjDqB=oh+c4h7oBqD	2.30E+11	0.0	20000.0
777.	nc4h9o2h=>oh+ch3hco+c2h5	1.50E+16	0.0	42000.0
778.	c4h7oAqB=>oh+hco+ethco	1.00E+16	0.0	43000.0
779.	c4h7oAqC=>oh+ch2hco+ch3hco	1.00E+16	0.0	43000.0
780.	c4h7oAqD=>oh+ch2o+ch2ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
781.	c4h7oBqA=>oh+ch2o+c2h5co	1.00E+16	0.0	43000.0
782.	c4h7oBqC=>oh+ch3co+ch3hco	1.00E+16	0.0	43000.0
783.	c4h7oBqD=>oh+ch2o+ch2coch3	1.00E+16	0.0	43000.0
784.	c4h8o#3+H=>H2+ch2co+c2h5	2.70E+07	2.0	5000.0
785.	c4h8o#3+oh=>h2o+ch2co+c2h5	7.80E+06	2.0	-765.0
786.	c4h8o#3+ho2=>h2o2+ch2co+c2h5	1.20E+12	0.0	15500.0
787.	c4h8o#3+ch3=>ch4+ch2co+c2h5	6.00E+11	0.0	9600.0
788.	c4h8o#3+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+c2h5	6.00E+11	0.0	9600.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

789.	c4h8o#3+c2h5=>c2h6+ch2co+c2h5	6.00E+11	0.0	11000.0
790.	c4h8o#3+O=>oh+ch2hco+c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
791.	c4h8o#4+H=>H2+ch3chch2hco	2.70E+07	2.0	5000.0
792.	c4h8o#4+H=>H2+ch3coc2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
793.	c4h8o#4+oh=>h2o+ch3chch2hco	7.80E+06	2.0	-765.0
794.	c4h8o#4+oh=>h2o+ch3coc2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
795.	c4h8o#4+ho2=>h2o2+ch3chch2hco	1.20E+12	0.0	15500.0
796.	c4h8o#4+ho2=>h2o2+ch3coc2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
797.	c4h8o#4+ch3=>ch4+ch3chch2hco	6.00E+11	0.0	9600.0
798.	c4h8o#4+ch3=>ch4+ch3coc2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
799.	c4h8o#4+ch3o2=>ch3o2h+ch3chch2hco	4.50E+12	0.0	17500.0
800.	c4h8o#4+ch3o2=>ch3o2h+ch3coc2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
801.	c4h8o#4+c2h5=>c2h6+ch3chch2hco	6.00E+11	0.0	11000.0
802.	c4h8o#4+c2h5=>c2h6+ch3coc2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
803.	c4h8o#4+O=>oh+ch3chch2hco	7.80E+13	0.0	5200.0
804.	c4h8o#4+O=>oh+ch3coc2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
805.	c4h8o#5+H=H2+ch2ch2ch2hco	2.70E+07	2.0	5000.0
806.	c4h8o#5+oh=h2o+ch2ch2ch2hco	7.80E+06	2.0	-765.0
807.	c4h8o#5+ho2=h2o2+ch2ch2ch2hco	1.20E+12	0.0	15500.0
808.	c4h8o#5+ch3=ch4+ch2ch2ch2hco	6.00E+11	0.0	9600.0
809.	c4h8o#5+ch3o2=ch3o2h+ch2ch2ch2hco	4.50E+12	0.0	17500.0
810.	c4h8o#5+c2h5=c2h6+ch2ch2ch2hco	6.00E+11	0.0	11000.0
811.	c4h8o#5+O=oh+ch2ch2ch2hco	7.80E+13	0.0	5200.0
812.	c2c4h8=c4h6+H2	1.00E+13	0.0	65500.0
813.	sc4h9=c4h8+H	2.00E+13	0.0	40400.0
814.	c4h8+oh=ch2o+nc3h7	1.00E+12	0.0	0.0
815.	c4h8+oh=ch3hco+c2h5	1.00E+12	0.0	0.0
816.	c4h8+oh=ethco+ch3	1.00E+12	0.0	0.0
817.	c4h8+oh=ch3co+c2h6	5.00E+11	0.0	0.0
818.	c4h8+oh=c2h5co+ch4	5.00E+11	0.0	0.0
819.	t2c4h8+oh=ch3hco+c2h5	2.60E+13	0.0	0.0
820.	c2c4h8+oh=ch3hco+c2h5	2.60E+13	0.0	0.0
821.	c4h8+O=c3h6+ch2o	7.23E+05	2.3	-1050.0
822.	c4h8+O=ch3hco+c2h4	1.30E+13	0.0	850.0
823.	c4h8+O=c2h5+ch3co	1.62E+13	0.0	850.0
824.	c2c4h8+O=ic3h7+hco	6.03E+12	0.0	0.0
825.	c2c4h8+O=ch3hco+c2h4	1.00E+12	0.0	0.0
826.	t2c4h8+O=ic3h7+hco	6.03E+12	0.0	0.0
827.	t2c4h8+O=ch3hco+c2h4	1.00E+12	0.0	0.0
828.	c4h8+ho2=>ch2o+c3h6+oh	2.50E+12	0.0	14340.0
829.	c4h8+o2=Cc4h7-1+ho2	4.00E+12	0.0	40000.0
830.	c4h8+ho2=Cc4h7-1+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
831.	c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
832.	c4h8+O=Cc4h7-1+oh	2.60E+12	0.0	4500.0
833.	c4h8+H=Cc4h7-1+H2	1.95E+13	0.0	4445.0
834.	c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
835.	c4h8+c2h5=Cc4h7-1+c2h6	1.00E+11	0.0	8300.0
836.	c4h8+ac3h5=Cc4h7-1+c3h6	8.00E+10	0.0	12400.0
837.	c4h8+sc3h5=Cc4h7-1+c3h6	8.00E+10	0.0	12400.0
838.	c4h8+tc3h5=Cc4h7-1+c3h6	8.00E+10	0.0	12400.0
839.	c4h8+o2=Dc4h7-1+ho2	1.26E+13	0.0	49000.0
840.	c4h8+H=Dc4h7-1+H2	2.81E+07	2.0	7700.0
841.	c4h8+O=Dc4h7-1+oh	2.44E+06	2.4	5505.0
842.	c4h8+oh=Dc4h7-1+h2o	2.07E+07	1.7	753.0
843.	c4h8+ho2=Dc4h7-1+h2o2	8.50E+12	0.0	20460.0
844.	c4h8+ch3=Dc4h7-1+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
845.	c4h8+c2h5=Dc4h7-1+c2h6	5.00E+10	0.0	13400.0
846.	c4h8+ch3o=Dc4h7-1+ch3oh	1.50E+11	0.0	7000.0
847.	c2c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o	9.00E+06	2.0	-60.0
848.	c2c4h8+H=Cc4h7-1+H2	1.00E+13	0.0	3500.0
849.	c2c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4	1.00E+11	0.0	8200.0
850.	t2c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o	9.00E+06	2.0	-60.0
851.	t2c4h8+H=Cc4h7-1+H2	5.00E+12	0.0	3500.0
852.	t2c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4	1.00E+11	0.0	8200.0
853.	c4h8=c2c4h8	4.00E+11	0.0	60000.0
854.	c4h8=t2c4h8	4.00E+11	0.0	60000.0
855.	c2c4h8=t2c4h8	3.62E+13	0.0	61330.0
856.	c4h8=ac3h5+ch3	1.50E+19	-1.0	73400.0
857.	c4h8=c2h3+c2h5	1.00E+19	-1.0	96770.0
858.	c2c4h8=sc3h5+ch3	2.00E+16	0.0	71300.0
859.	t2c4h8=sc3h5+ch3	2.00E+16	0.0	71300.0
860.	c4h8=Cc4h7-1+H	4.08E+18	-1.0	97350.0
861.	c2c4h8=Cc4h7-1+H	4.07E+18	-1.0	97350.0
862.	t2c4h8=Cc4h7-1+H	4.07E+18	-1.0	97350.0
863.	Dc4h7-1=c2h4+c2h3	5.00E+13	0.0	38000.0
864.	Dc4h7-1=c4h6+H	1.00E+14	0.0	44000.0
865.	Dc4h7-1+o2=c4h6+ho2	1.02E+12	0.0	22654.0
866.	Dc4h7-1+ho2=c4h6+h2o2	1.00E+12	0.0	0.0
867.	Dc4h7-1+oh=c4h6+h2o	4.00E+13	0.0	0.0
868.	Dc4h7-1+O=c4h6+oh	4.00E+13	0.0	0.0
869.	Dc4h7-1+H=c4h6+H2	3.16E+13	0.0	0.0
870.	Dc4h7-1+ch3=c4h6+ch4	7.94E+12	0.0	0.0
871.	Dc4h7-1+c2h3=c4h6+c2h4	4.00E+12	0.0	0.0
872.	Dc4h7-1+c2h5=c4h6+c2h6	4.00E+12	0.0	0.0
873.	Dc4h7-1+c2h5=c4h8+c2h4	5.00E+11	0.0	0.0
874.	Dc4h7-1+c2h5=t2c4h8+c2h4	5.00E+11	0.0	0.0
875.	Dc4h7-1+c2h5=c2c4h8+c2h4	5.00E+11	0.0	0.0
876.	Dc4h7-1+c3h3=c4h6+pc3h4	4.00E+12	0.0	0.0
877.	Dc4h7-1+c3h3=c4h6+ac3h4	4.00E+12	0.0	0.0
878.	Dc4h7-1+ac3h5=c4h6+c3h6	6.30E+12	0.0	0.0
879.	Dc4h7-1+Dc4h7-1=c4h6+c4h8	3.16E+12	0.0	0.0
880.	Dc4h7-1+c2h4=c4h8+c2h3	1.00E+11	0.0	15000.0
881.	Dc4h7-1+c3h6=c4h8+ac3h5	1.00E+11	0.0	9800.0
882.	Dc4h7-1+c4h8=c4h8+Cc4h7-1	1.00E+11	0.0	8300.0
883.	Dc4h7-1+t2c4h8=c4h8+Cc4h7-1	2.00E+11	0.0	9800.0
884.	Dc4h7-1+c2c4h8=c4h8+Cc4h7-1	2.00E+11	0.0	9800.0
885.	c4h6+Dc4h7-1=nc4h5+c4h8	6.32E+02	3.1	20010.0
886.	c4h6+Dc4h7-1=ic4h5+c4h8	6.32E+02	3.1	18010.0
887.	Dc4h7-1+ho2=ac3h5+ch2o+oh	1.00E+12	0.0	0.0
888.	Dc4h7-1+ch3o2=ac3h5+ch3o+ch2o	1.00E+12	0.0	0.0
889.	Dc4h7-1+c2h5o2=ac3h5+c2h5o+ch2o	1.00E+12	0.0	0.0
890.	Cc4h7-1+o2=c4h6+ho2	1.02E+12	0.0	22654.0
891.	Cc4h7-1=c4h6+H	1.20E+14	0.0	49300.0
892.	Cc4h7-1=c2h4+c2h3	1.00E+14	0.0	49000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

893.	Cc4h7-1+ho2=c4h6+h2o2	1.00E+12	0.0	0.0
894.	Cc4h7-1+oh=c4h6+h2o	4.00E+13	0.0	0.0
895.	Cc4h7-1+O=c4h6+oh	4.00E+13	0.0	0.0
896.	Cc4h7-1+H=c4h6+H2	3.16E+12	0.0	0.0
897.	Cc4h7-1+ch3=c4h6+ch4	1.00E+13	0.0	0.0
898.	Cc4h7-1+c2h3=c4h6+c2h4	4.00E+12	0.0	0.0
899.	Cc4h7-1+c2h5=c4h6+c2h6	4.00E+12	0.0	0.0
900.	Cc4h7-1+c2h5=c4h8+c2h4	5.00E+11	0.0	0.0
901.	Cc4h7-1+c2h5=t2c4h8+c2h4	5.00E+11	0.0	0.0
902.	Cc4h7-1+c2h5=c2c4h8+c2h4	5.00E+11	0.0	0.0
903.	Cc4h7-1+c3h3=c4h6+pc3h4	4.00E+12	0.0	0.0
904.	Cc4h7-1+c3h3=c4h6+ac3h4	4.00E+12	0.0	0.0
905.	Cc4h7-1+ac3h5=c4h6+c3h6	6.30E+12	0.0	0.0
906.	Cc4h7-1+ac3h5=c4h8+ac3h4	1.00E+12	0.0	0.0
907.	Cc4h7-1+ac3h5=>MHD	3.20E+11	0.0	0.0
908.	Cc4h7-1+Cc4h7-1=c4h6+c4h8	3.00E+12	0.0	0.0
909.	Cc4h7-1+ho2=c4e1ojC+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
910.	Cc4h7-1+ch3o2=c4e1ojC+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
911.	Cc4h7-1+c2h5o2=c4e1ojC+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
912.	c4e1ojC=acrol+ch3	7.94E+14	0.0	19000.0
913.	c4e1ojC=c2h3+ch3hco	7.94E+14	0.0	19000.0
914.	c3h3+ch3=butyne	5.00E+12	0.0	0.0
915.	butyne+ho2=nc4h5+h2o2	5.00E+11	0.0	17000.0
916.	butyne+ho2=ic4h5+h2o2	5.00E+11	0.0	17000.0
917.	butyne+oh=nc4h5+h2o	2.60E+02	3.0	200.0
918.	butyne+oh=ic4h5+h2o	2.60E+02	3.0	200.0
919.	butyne+oh=ch2co+c2h5	4.00E-04	4.5	-1000.0
920.	butyne+O=c3h6+co	2.00E+13	0.0	1660.0
921.	butyne+H=ac3h4+ch3	1.30E+05	2.5	1000.0
922.	butyne+H=c2h5+c2h2	6.50E+04	2.5	1000.0
923.	butyne+H=ic4h5+H2	6.50E+13	0.0	9400.0
924.	butyne+H=nc4h5+H2	6.50E+13	0.0	9400.0
925.	butyne+ch3=ic4h5+ch4	1.00E+14	0.0	19500.0
926.	butyne+ch3=nc4h5+ch4	1.00E+14	0.0	19500.0
927.	butyn2=c4h6	3.00E+13	0.0	65000.0
928.	butyn2=MEALL	3.00E+13	0.0	67000.0
929.	butyn2+H=pc3h4+ch3	2.60E+05	2.5	1000.0
930.	butyne=MEALL	2.50E+13	0.0	65000.0
931.	MEALL=c4h6	2.50E+13	0.0	63000.0
932.	MEALL=c3h3+ch3	2.00E+15	0.0	75000.0
933.	MEALL+H=ac3h4+ch3	6.00E+12	0.0	2100.0
934.	MEALL+H=pc3h4+ch3	6.00E+12	0.0	2100.0
935.	ic3h7+c2h2=c4h6+ch3	2.77E+10	0.0	6504.0
936.	c4h6=c2h4+c2h2	1.00E+14	0.0	75000.0
937.	c4h6=nc4h5+H	1.58E+16	0.0	110000.0
938.	c4h6+o2=nc4h5+ho2	2.80E+13	0.0	62500.0
939.	c4h6+o2=ic4h5+ho2	1.40E+12	0.0	50600.0
940.	c4h6+ho2=nc4h5+h2o2	2.00E+11	0.0	12600.0
941.	c4h6+ho2=ic4h5+h2o2	1.00E+11	0.0	9920.0
942.	c4h6+oh=nc4h5+h2o	1.00E+07	2.0	7253.0
943.	c4h6+oh=ic4h5+h2o	8.00E+06	2.0	3744.0
944.	c4h6+O=ic4h5+oh	4.53E+15	-0.5	7028.0
945.	c4h6+O=nc4h5+oh	2.27E+15	-0.5	7028.0
946.	c4h6+H=pc3h4+ch3	1.30E+03	2.5	1000.0
947.	c4h6+H=ac3h4+ch3	1.00E+13	0.0	15000.0
948.	c4h6+H=nc4h5+H2	5.00E+15	0.0	22800.0
949.	c4h6+H=ic4h5+H2	2.50E+15	0.0	22800.0
950.	c4h6+ch3=nc4h5+ch4	2.00E+14	0.0	24800.0
951.	c4h6+ch3=ic4h5+ch4	4.00E+14	0.0	22800.0
952.	c4h6+c2h3=nc4h5+c2h4	6.32E+02	3.1	20010.0
953.	c4h6+c2h3=ic4h5+c2h4	6.32E+02	3.1	18010.0
954.	c4h6+Cc4h7-1=nc4h5+c4h8	6.32E+02	3.1	20010.0
955.	c4h6+Cc4h7-1=ic4h5+c4h8	6.32E+02	3.1	18010.0
956.	c4h6+oh=ch3hco+c2h3	5.60E+12	0.0	-900.0
957.	c4h6+O=>ac3h5hco	3.00E+13	0.0	80.0
958.	c4h6+ho2=>c4h6o2h	2.00E+11	0.0	8000.0
959.	hoc4h6=>ac3h5hco+H	5.00E+14	0.0	28000.0
960.	ac3h5hco=>c3h6+co	2.00E+13	0.0	57000.0
961.	ac3h5hco=>c2h4+ch2co	5.00E+14	1.0	78000.0
962.	ac3h5hco+O=>c2h3o+c2h3o	1.20E+08	1.4	530.0
963.	ac3h5hco+oh=>ch2co+c2h3+h2o	2.02E+13	0.0	5955.0
964.	ac3h5hco+ho2=>c2h3o+c2h3o+oh	5.00E+12	0.0	14964.0
965.	ac3h5hco+H=>ac3h5co+H2	4.10E+09	1.2	2405.0
966.	ac3h5hco+oh=>ac3h5co+h2o	2.35E+10	0.7	-1113.0
967.	ac3h5hco+ho2=>ac3h5co+h2o2	1.70E+12	0.0	10700.0
968.	ac3h5hco+O=>ac3h5co+oh	5.85E+12	0.0	1808.0
969.	ac3h5hco+ch3=>ac3h5co+ch4	1.70E+12	0.0	8440.0
970.	ac3h5hco+c2h3=>ac3h5co+c2h4	1.70E+12	0.0	8440.0
971.	ac3h5hco+ac3h5=>ac3h5co+c3h6	1.70E+12	0.0	8440.0
972.	ac3h5hco+oh=c2h3chcho+h2o	3.12E+06	2.0	-298.0
973.	ac3h5hco+ho2=c2h3chcho+h2o2	9.63E+03	2.6	13910.0
974.	ac3h5hco+ch3o2=c2h3chcho+ch3o2h	1.99E+12	0.0	17050.0
975.	c4h6o2h=>acrol+oh+CH2	1.00E+10	0.0	19500.0
976.	c4h6o2h=>ac3h5hco+oh	2.00E+11	0.0	19500.0
977.	ac3h5co+H=>ac3h5hco	5.00E+12	0.0	0.0
978.	ac3h5co+o2=>acrol+co+oh	1.00E+12	0.0	25000.0
979.	ac3h5co=>ch2co+c2h3	1.00E+15	0.0	65000.0
980.	ac3h5co=>co+c2h2+ch3	5.00E+14	0.0	65000.0
981.	ac3h5co=>ac3h5+co	6.20E+15	-1.1	-330.0
982.	c2h3chcho+O=acrol+hco	2.00E+14	0.0	0.0
983.	c2h3chcho+ho2=oh+acrol+hco	2.00E+14	0.0	0.0
984.	ic4h5+o2=c2h3co+ch2o	2.00E+11	0.0	14000.0
985.	ic4h5+O=>ch2co+c2h3	1.00E+13	0.0	2000.0
986.	ic4h5+ho2=ch2co+c2h3+oh	1.00E+12	0.0	2000.0
987.	ic4h5+ho2=>ac3h5co+oh	1.00E+13	0.0	2000.0
988.	c3h6+ic4h5=ac3h5+c4h6	1.00E+11	0.0	9800.0
989.	ic4h5+c2h2=c4h6+c2h	1.80E+11	0.0	17300.0
990.	ic4h5+ch2o=c4h6+hco	4.00E+12	0.0	8840.0
991.	nc4h5=c2h3+c2h2	5.00E+13	0.0	44000.0
992.	nc4h5+o2=acrol+hco	2.00E+11	0.0	14000.0
993.	nc4h5+O=>ac3h5+co	1.00E+13	0.0	2000.0
994.	nc4h5+oh=c4h4+h2o	2.00E+07	2.0	1000.0
995.	nc4h5+ho2=>ac3h5+co+oh	1.00E+13	0.0	0.0
996.	nc4h5+H=c4h4+H2	1.00E+14	0.0	0.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

997.	nc4h5+H=ic4h5+H	1.00E+14	0.0	0.0
998.	nc4h5+c2h2=c4h6+c2h	1.80E+11	0.0	17300.0
999.	nc4h5+ch2o=c4h6+hco	4.00E+12	0.0	8840.0
1000.	c3h6+nc4h5=ac3h5+c4h6	1.00E+11	0.0	9800.0
1001.	c4h4=c2h2+c2h2	3.20E+13	0.0	77100.0
1002.	c4h4+M=nc4h3+H+M	1.00E+20	0.0	99300.0
1003.	c4h4=ic4h3+H	6.30E+13	0.0	87100.0
1004.	c4h4=c4h2+H2	1.26E+15	0.0	94700.0
1005.	c4h4+o2=nc4h3+ho2	1.00E+13	0.0	63200.0
1006.	c4h4+o2=ic4h3+ho2	1.00E+13	0.0	44640.0
1007.	c4h4+ho2=nc4h3+h2o2	2.00E+11	0.0	12600.0
1008.	c4h4+ho2=ic4h3+h2o2	1.00E+11	0.0	9920.0
1009.	c4h4+ho2=c3h3+hco+oh	4.00E+11	0.0	8000.0
1010.	c4h4+oh=ic4h3+h2o	2.00E+07	2.0	2000.0
1011.	c4h4+oh=nc4h3+h2o	7.50E+06	2.0	5000.0
1012.	c4h4+O=ac3h4+co	3.00E+13	0.0	1810.0
1013.	c4h4+H=ic4h3+H2	3.33E+05	2.5	9240.0
1014.	c4h4+H=nc4h3+H2	2.00E+07	2.0	15000.0
1015.	c4h4+c2h=ic4h3+c2h2	3.98E+13	0.0	0.0
1016.	c4h4+ch3=ic4h3+ch4	1.66E+01	3.7	9499.0
1017.	c4h4+nc4h5=ic4h3+c4h6	4.00E+11	0.0	5000.0
1018.	c4h4+ic4h5=ic4h3+c4h6	4.00E+11	0.0	5000.0
1019.	c2h2+c2h2=ic4h3+H	6.31E+13	0.0	41600.0
1020.	ic4h3+o2=ch2co+hcco	1.00E+12	0.0	0.0
1021.	ic4h3+oh=c4h2+h2o	3.00E+13	0.0	0.0
1022.	ic4h3+O=ch2co+c2h	2.00E+13	0.0	0.0
1023.	ic4h3+O=h2c4o+H	2.00E+13	0.0	0.0
1024.	ic4h3+H=c4h2+H2	5.00E+13	0.0	0.0
1025.	ic4h3+CH2=ac3h4+c2h	2.00E+13	0.0	0.0
1026.	nc4h3+oh=c4h2+h2o	3.00E+13	0.0	0.0
1027.	nc4h3+H=c4h2+H2	5.00E+13	0.0	0.0
1028.	nc4h3+H=ic4h3+H	1.00E+14	0.0	0.0
1029.	h2c4o+oh=ch2co+hcco	1.00E+07	2.0	2000.0
1030.	h2c4o+H=c2h2+hcco	5.00E+13	0.0	3000.0
1031.	c2h2+c2h=c4h2+H	1.82E+14	0.0	467.0
1032.	c4h2+M=c4h+H+M	3.50E+17	0.0	80065.0
1033.	c4h2+oh=h2c4o+H	6.66E+12	0.0	-410.0
1034.	c4h2+O=c3h2+co	1.20E+12	0.0	0.0
1035.	c4h+o2=c2h+co+co	1.00E+14	0.0	0.0
1036.	hco+nc3h7=nc3h7hco	5.20E+12	0.0	0.0
1037.	nc3h7hco+H=H2+c3h7co	4.00E+13	0.0	4200.0
1038.	nc3h7hco+oh=h2o+c3h7co	4.20E+12	0.0	500.0
1039.	nc3h7hco+ho2=h2o2+c3h7co	1.00E+12	0.0	10000.0
1040.	nc3h7hco+ch3=ch4+c3h7co	2.00E-06	5.6	2500.0
1041.	nc3h7hco+c2h5=c2h6+c3h7co	1.30E+12	0.0	8500.0
1042.	c3h7co=>co+nc3h7	2.00E+13	0.0	28700.0
1043.	c3h7co+ho2=>co2+oh+nc3h7	2.00E+13	0.0	0.0
1044.	butanone+H=>H2+c2h5coch2	2.70E+07	2.0	5000.0
1045.	butanone+oh=>h2o+c2h5coch2	7.80E+06	2.0	-765.0
1046.	butanone+ho2=>h2o2+c2h5coch2	1.20E+12	0.0	15500.0
1047.	butanone+ch3=>ch4+c2h5coch2	6.00E+11	0.0	9600.0
1048.	butanone+ch3o2=>ch3o2h+c2h5coch2	6.00E+11	0.0	9600.0
1049.	butanone+c2h5=>c2h6+c2h5coch2	6.00E+11	0.0	11000.0
1050.	c2h5coch2=ch2co+c2h5	1.57E+13	0.0	30000.0
1051.	c2h5coch2+o2=c2h5coch2qj	1.90E+19	-2.5	0.0
1052.	c2h5coch2qj=ch3chcoch2q	5.75E+08	1.0	22700.0
1053.	ch3chcoch2q+o2=ch3chqjcoch2q	1.90E+19	-2.5	0.0
1054.	ch3chqjcoch2q=>2oh+choco+ch3hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1055.	c2h4+ch3co=ch3coc2h4	1.50E+11	0.0	8300.0
1056.	ch3coc2h4+o2=MVK+ho2	3.80E+10	0.0	-2000.0
1057.	ch3coc2h4+o2=ch3coc2h4qj	4.82E+36	-8.2	5167.0
1058.	ch3coc2h4qj=ch2coc2h4q	1.48E+08	1.0	22000.0
1059.	ch2coc2h4q+o2=ch2qjcoc2h4q	4.82E+36	-8.2	5167.0
1060.	ch2qjcoc2h4q=>2oh+ch2o+hcoch2co	1.00E+16	0.0	43000.0
1061.	c2h4+ch2hco=ch2ch2ch2hco	1.50E+11	0.0	8300.0
1062.	ch2ch2ch2hco+o2=ac3h5hco+ho2	3.80E+10	0.0	-2000.0
1063.	MVK+oh=>ch2o+ch2coch3	1.40E+12	0.0	-900.0
1064.	MVK+oh=>ch3+ch3cocho	1.40E+12	0.0	-900.0
1065.	c2h3+ch2co=ch2coc2h3	2.11E+11	0.0	7350.0
1066.	c2h5+nc3h7=c5h12	5.20E+12	0.0	0.0
1067.	c5h12+H=H2+ch3+2c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
1068.	c5h12+oh=h2o+ch3+2c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
1069.	c5h12+ho2=h2o2+ch3+2c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
1070.	c5h12+ch3=ch4+ch3+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1071.	c5h12+ch3o2=ch3o2h+ch3+2c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
1072.	c5h12+c2h5=c2h6+ch3+2c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
1073.	c5h12+O=oh+ch3+2c2h4	3.40E+07	1.8	550.0
1074.	Ac5h11=nc3h7+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
1075.	Bc5h11=c2h5+c3h6	2.00E+13	0.0	28700.0
1076.	Cc5h11=ch3+c4h8	4.00E+13	0.0	31000.0
1077.	Ac5h11=H+c5h10	3.00E+13	0.0	38000.0
1078.	Bc5h11=H+c5h10	3.00E+13	0.0	39000.0
1079.	Bc5h11=H+c2c5h10	3.00E+13	0.0	38000.0
1080.	Bc5h11=H+t2c5h10	3.00E+13	0.0	38000.0
1081.	Cc5h11=H+c2c5h10	6.00E+13	0.0	38000.0
1082.	Cc5h11=H+t2c5h10	6.00E+13	0.0	38000.0
1083.	Ac5h11+o2=c5h10+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
1084.	Bc5h11+o2=c2c5h10+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
1085.	Bc5h11+o2=t2c5h10+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
1086.	Bc5h11+o2=c5h10+ho2	8.10E+11	0.0	5000.0
1087.	Cc5h11+o2=c2c5h10+ho2	3.90E+12	0.0	5000.0
1088.	Cc5h11+o2=t2c5h10+ho2	3.90E+12	0.0	5000.0
1089.	Ac5h11=Bc5h11	9.84E+10	0.0	19660.0
1090.	Ac5h11+o2=c5h11qjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
1091.	Bc5h11+o2=c5h11qjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
1092.	Cc5h11+o2=c5h11qjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
1093.	Ac5h11+ho2=>ch2o+pc4h9+oh	1.00E+13	0.0	0.0
1094.	Ac5h11+O=ch2o+pc4h9	1.61E+13	0.0	0.0
1095.	Ac5h11+o2=ch2o+oh+c4h8	2.10E+11	0.0	6158.0
1096.	Bc5h11+ho2=>ch3hco+oh+nc3h7	1.00E+13	0.0	0.0
1097.	Bc5h11+O=ch3hco+nc3h7	1.61E+13	0.0	0.0
1098.	Bc5h11+o2=>oh+ch3hco+c3h6	2.10E+11	0.0	6158.0
1099.	Cc5h11+ho2=>oh+ethco+c2h5	1.00E+13	0.0	0.0
1100.	Cc5h11+O=ethco+c2h5	1.61E+13	0.0	0.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

1101.	Cc5h11+o2=>oh+ethco+c2h4	2.10E+11	0.0	6158.0
1102.	c5h11qjA=c5h10rBqA	3.30E+09	1.0	32500.0
1103.	c5h11qjA=c5h10rCqA	5.70E+08	1.0	25000.0
1104.	c5h11qjA=c5h10rDqA	9.90E+07	1.0	22000.0
1105.	c5h11qjA=c5h10rEqA	2.50E+07	1.0	24000.0
1106.	c5h11qjB=c5h10rAqB	5.00E+09	1.0	35500.0
1107.	c5h11qjB=c5h10rCqB	3.30E+09	1.0	32500.0
1108.	c5h11qjB=c5h10rDqB	5.70E+08	1.0	25000.0
1109.	c5h11qjB=c5h10rEqB	1.50E+08	1.0	25000.0
1110.	c5h11qjC=c5h10rAqC	1.70E+09	1.0	28000.0
1111.	c5h11qjC=c5h10rBqC	6.70E+09	1.0	32500.0
1112.	c5h11qjA+ho2=nc5h11o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
1113.	c5h11qjB+ho2=nc5h11o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
1114.	c5h11qjC+ho2=nc5h11o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
1115.	c5h10rBqA=c5h10rEqA	8.60E+08	1.0	19800.0
1116.	c5h10rDqA=c5h10rAqA	5.70E+08	1.0	15300.0
1117.	c5h10rEqA=c5h10rAqA	9.90E+07	1.0	10000.0
1118.	c5h10rAqB=c5h10rDqB	5.70E+08	1.0	17300.0
1119.	c5h10rAqB=c5h10rEqB	1.50E+08	1.0	14500.0
1120.	c5h10rEqB=c5h10rBqB	2.90E+08	1.0	13300.0
1121.	c5h10rAqC=c5h10rBqC	5.70E+08	1.0	17300.0
1122.	c5h10rAqA+o2=c5h10qjAqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
1123.	c5h10rBqA+o2=c5h10qjBqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
1124.	c5h10rCqA+o2=c5h10qjCqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
1125.	c5h10rDqA+o2=c5h10qjDqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
1126.	c5h10rEqA+o2=c5h10qjEqA	4.82E+36	-8.2	5167.0
1127.	c5h10rAqB+o2=c5h10qjAqB	4.82E+36	-8.2	5167.0
1128.	c5h10rBqB+o2=c5h10qjBqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
1129.	c5h10rCqB+o2=c5h10qjCqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
1130.	c5h10rDqB+o2=c5h10qjDqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
1131.	c5h10rEqB+o2=c5h10qjEqB	4.82E+36	-8.2	5167.0
1132.	c5h10rAqC+o2=c5h10qjAqC	4.82E+36	-8.2	5167.0
1133.	c5h10rBqC+o2=c5h10qjBqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
1134.	c5h10rCqA=>oh+ch2o+c4h8	5.00E+13	0.0	25500.0
1135.	c5h10rAqC=>oh+ethco+c2h4	5.00E+13	0.0	25500.0
1136.	c5h10rDqB=>oh+ch3hco+c3h6	5.00E+13	0.0	25500.0
1137.	c5h10rAqA=oh+nc4h9hco	1.00E+09	0.0	7500.0
1138.	c5h10rBqB=oh+pentanone	1.00E+09	0.0	7500.0
1139.	c5h10rBqA=oh+c5h10o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
1140.	c5h10rCqA=oh+c5h10o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
1141.	c5h10rDqA=oh+c5h10o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
1142.	c5h10rEqA=oh+c5h10o#6	1.70E+08	0.0	1950.0
1143.	c5h10rAqB=oh+c5h10o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
1144.	c5h10rCqB=oh+c5h10o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
1145.	c5h10rDqB=oh+c5h10o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
1146.	c5h10rEqB=oh+c5h10o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
1147.	c5h10rAqC=oh+c5h10o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
1148.	c5h10rBqC=oh+c5h10o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
1149.	c5h10rAqB=ho2+c5h10	8.50E+12	0.0	26000.0
1150.	c5h10rBqA=ho2+c5h10	8.50E+12	0.0	26000.0
1151.	c5h10rBqC=ho2+c2c5h10	8.50E+12	0.0	26000.0
1152.	c5h10rBqC=ho2+t2c5h10	8.50E+12	0.0	26000.0
1153.	c5h10rCqB=ho2+c2c5h10	8.50E+12	0.0	26000.0
1154.	c5h10rCqB=ho2+t2c5h10	8.50E+12	0.0	26000.0
1155.	c5h10qjAqA=oh+c5h9oAqA	7.79E+12	0.0	35000.0
1156.	c5h10qjBqA=oh+c5h9oAqB	2.68E+12	0.0	30500.0
1157.	c5h10qjCqA=oh+c5h9oAqC	4.60E+11	0.0	23000.0
1158.	c5h10qjDqA=oh+c5h9oAqD	7.90E+10	0.0	20000.0
1159.	c5h10qjEqA=oh+c5h9oAqE	1.36E+10	0.0	19000.0
1160.	c5h10qjAqB=oh+c5h9oBqA	1.34E+12	0.0	27500.0
1161.	c5h10qjCqB=oh+c5h9oBqC	1.34E+12	0.0	27500.0
1162.	c5h10qjDqB=oh+c5h9oBqD	2.30E+11	0.0	20000.0
1163.	c5h10qjEqB=oh+c5h9oBqE	3.95E+10	0.0	17000.0
1164.	c5h10qjAqC=oh+c5h9oCqA	2.30E+11	0.0	20000.0
1165.	c5h10qjBqC=oh+c5h9oCqB	1.34E+12	0.0	27500.0
1166.	nc5h11o2h=>oh+ch2o+pc4h9	1.50E+16	0.0	42000.0
1167.	c5h9o2h=>oh+ch2o+c2h4+c2h3	1.50E+16	0.0	42000.0
1168.	c5h9e2qC=>oh+ch2o+c2h4+c2h3	1.50E+16	0.0	42000.0
1169.	c5h9oAqA=oh+co2+pc4h9	1.00E+16	0.0	43000.0
1170.	c5h9oAqB=oh+hco+nc3h7hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1171.	c5h9oAqC=oh+ch2hco+ethco	1.00E+16	0.0	43000.0
1172.	c5h9oAqD=oh+ch3hco+ch2ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1173.	c5h9oAqE=oh+ch2o+ch2ch2ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1174.	c5h9oBqA=oh+ch2o+c3h7co	1.00E+16	0.0	43000.0
1175.	c5h9oBqC=oh+ch3co+ethco	1.00E+16	0.0	43000.0
1176.	c5h9oBqD=oh+ch3hco+ch2coch3	1.00E+16	0.0	43000.0
1177.	c5h9oBqE=oh+c2h4+ch3co+ch2o	1.00E+16	0.0	43000.0
1178.	c5h9oCqA=oh+c2h5+ch2co+ch2o	1.00E+16	0.0	43000.0
1179.	c5h9oCqB=oh+c2h5co+ch3hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1180.	c5h10o#3+H=>H2+ch2co+ch3+c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
1181.	c5h10o#3+oh=>h2o+ch2co+ch3+c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
1182.	c5h10o#3+ho2=>h2o2+ch2co+ch3+c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
1183.	c5h10o#3+ch3=>ch4+ch2co+ch3+c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1184.	c5h10o#3+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3+c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1185.	c5h10o#3+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3+c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
1186.	c5h10o#3+O=>oh+hco+2c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
1187.	c5h10o#4+H=>H2+hco+2c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
1188.	c5h10o#4+oh=>h2o+c2h5coc2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
1189.	c5h10o#4+oh=>h2o+ac3h5hco+ch3	7.80E+06	2.0	-765.0
1190.	c5h10o#4+oh=>h2o+hco+c4h8	7.80E+06	2.0	-765.0
1191.	c5h10o#4+ho2=>h2o2+hco+2c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
1192.	c5h10o#4+ch3=>ch4+hco+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1193.	c5h10o#4+ch3o2=>ch3o2h+hco+2c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
1194.	c5h10o#4+c2h5=>c2h6+hco+2c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
1195.	c5h10o#4+O=>oh+hco+2c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
1196.	c5h10o#6+H=>H2+ch2ch2hco+c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
1197.	c5h10o#6+oh=>h2o+ch2ch2hco+c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
1198.	c5h10o#6+ho2=>h2o2+ch2ch2hco+c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
1199.	c5h10o#6+ch3=>ch4+ch2ch2hco+c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1200.	c5h10o#6+ch3o2=>ch3o2h+ch2ch2hco+c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
1201.	c5h10o#6+c2h5=>c2h6+ch2ch2hco+c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
1202.	c5h10o#6+O=>oh+ch2ch2hco+c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
1203.	c5h10o#5+H=H2+Ac5h9o#5	2.70E+07	2.0	5000.0
1204.	c5h10o#5+oh=h2o+Ac5h9o#5	7.80E+06	2.0	-765.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

1205.	c5h10o#5+ho2=h2o2+Ac5h9o#5	1.20E+12	0.0	15500.0
1206.	c5h10o#5+ch3=ch4+Ac5h9o#5	6.00E+11	0.0	9600.0
1207.	c5h10o#5+ch3o2=ch3o2h+Ac5h9o#5	4.50E+12	0.0	17500.0
1208.	c5h10o#5+c2h5=c2h6+Ac5h9o#5	6.00E+11	0.0	11000.0
1209.	c5h10o#5+O=oh+Ac5h9o#5	7.80E+13	0.0	5200.0
1210.	c5h10o#5+H=H2+Dc5h9o#5	1.35E+07	2.0	5000.0
1211.	c5h10o#5+oh=h2o+Dc5h9o#5	3.90E+06	2.0	-765.0
1212.	c5h10o#5+ho2=h2o2+Dc5h9o#5	6.00E+11	0.0	15500.0
1213.	c5h10o#5+ch3=ch4+Dc5h9o#5	3.00E+11	0.0	9600.0
1214.	c5h10o#5+ch3o2=ch3o2h+Dc5h9o#5	2.25E+12	0.0	17500.0
1215.	c5h10o#5+c2h5=c2h6+Dc5h9o#5	3.00E+11	0.0	11000.0
1216.	c5h10o#5+O=oh+Dc5h9o#5	3.90E+13	0.0	5200.0
1217.	Ac5h9o#5=c3h6+ch2hco	5.00E+13	0.0	28800.0
1218.	Dc5h9o#5=Ec5oB	5.00E+13	0.0	28800.0
1219.	c5h10+ch3=nc3h7+c3h6	9.60E+10	0.0	8000.0
1220.	c2c5h10+ch3=>c2h5+c4h8	1.70E+11	0.0	7400.0
1221.	t2c5h10+ch3=>c2h5+c4h8	1.70E+11	0.0	7400.0
1222.	c5h10+oh=>ch3+nc3h7hco	1.00E+12	0.0	0.0
1223.	c5h10+oh=>ch2o+pc4h9	1.00E+12	0.0	0.0
1224.	c2c5h10+oh=>ch3+nc3h7hco	1.00E+12	0.0	0.0
1225.	t2c5h10+oh=>ch3+nc3h7hco	1.00E+12	0.0	0.0
1226.	c2c5h10+oh=>ch2o+pc4h9	1.00E+12	0.0	0.0
1227.	t2c5h10+oh=>ch2o+pc4h9	1.00E+12	0.0	0.0
1228.	c5h10+O=>ch2co+ch3+H+c2h4	3.40E+07	1.8	550.0
1229.	c2c5h10+O=>ch2co+ch3+H+c2h4	3.40E+07	1.8	550.0
1230.	t2c5h10+O=>ch2co+ch3+H+c2h4	3.40E+07	1.8	550.0
1231.	c5h10+ho2=>oh+c5h10o#3	1.00E+12	0.0	14400.0
1232.	c2c5h10+ho2=>oh+c5h10o#3	1.00E+12	0.0	14400.0
1233.	t2c5h10+ho2=>oh+c5h10o#3	1.00E+12	0.0	14400.0
1234.	c5h10+H=H2+Cc5h9-1	1.70E+05	2.5	2490.0
1235.	c5h10+oh=h2o+Cc5h9-1	3.10E+06	2.0	-300.0
1236.	c5h10+ho2=h2o2+Cc5h9-1	9.60E+03	2.6	13900.0
1237.	c5h10+ch3=ch4+Cc5h9-1	2.20E+00	3.5	5675.0
1238.	c5h10+ch3o2=ch3o2h+Cc5h9-1	2.20E+00	3.5	5675.0
1239.	c5h10+c2h5=c2h6+Cc5h9-1	2.20E+00	3.5	6835.0
1240.	c5h10+O=oh+Cc5h9-1	6.00E+10	0.7	7682.0
1241.	c5h10+H=Dc5h9-1+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
1242.	c5h10+oh=Dc5h9-1+h2o	1.99E+06	2.0	-600.0
1243.	c5h10+ho2=Dc5h9-1+h2o2	8.00E+12	0.0	17000.0
1244.	c5h10+O=Dc5h9-1+oh	1.13E+03	3.3	1650.0
1245.	c5h10+ch3=Dc5h9-1+ch4	8.00E+11	0.0	9500.0
1246.	c5h10+H=Ec5h9-1+H2	5.70E+07	2.0	7700.0
1247.	c5h10+oh=Ec5h9-1+h2o	1.41E+07	1.8	974.0
1248.	c5h10+ho2=Ec5h9-1+h2o2	1.20E+13	0.0	19400.0
1249.	c5h10+O=Ec5h9-1+oh	4.36E+06	2.4	5500.0
1250.	c5h10+ch3=Ec5h9-1+ch4	1.30E+12	0.0	11600.0
1251.	sc3h5+c2h5=c2c5h10	1.00E+13	0.0	0.0
1252.	sc3h5+c2h5=t2c5h10	1.00E+13	0.0	0.0
1253.	Dc5h9-1=c5h8-13+H	1.20E+13	0.0	27600.0
1254.	Ec5h9-1=ac3h5+c2h4	2.50E+13	0.0	45000.0
1255.	Cc5h9-1+H=c5h10	1.00E+13	0.0	0.0
1256.	Cc5h9-1+H=c2c5h10	1.00E+13	0.0	0.0
1257.	Cc5h9-1+H=t2c5h10	1.00E+13	0.0	0.0
1258.	Cc5h9-1=c4h6+ch3	2.50E+13	0.0	45000.0
1259.	Cc5h9-1=c5h8-13+H	4.00E+13	0.0	47000.0
1260.	Cc5h9-1+o2=c5h8-13+ho2	5.90E+05	0.0	0.0
1261.	Cc5h9-1+ho2=>acrol+c2h5+oh	1.00E+13	0.0	0.0
1262.	Cc5h9-1+H=c5h8-13+H2	3.16E+13	0.0	0.0
1263.	Cc5h9-1+ch3=c5h8-13+ch4	1.00E+13	0.0	0.0
1264.	Cc5h9-1+c2h3=c5h8-13+c2h4	4.00E+12	0.0	0.0
1265.	Cc5h9-1+c2h5=c5h8-13+c2h6	4.00E+12	0.0	0.0
1266.	Cc5h9-1+ac3h5=c5h8-13+c3h6	1.33E+12	0.0	0.0
1267.	Ec5h9-1+o2=c5e1qjE	4.82E+36	-8.2	5167.0
1268.	c5e1qjE=Cc5e1qE	5.75E+08	1.0	19500.0
1269.	Cc5e1qE+o2=c5e1qEqjC	2.43E+39	-9.0	8620.0
1270.	c5e1qEqjC=oh+c5e1oEqC	5.75E+08	1.0	23000.0
1271.	c5e1oEqC=oh+acrol+ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1272.	c5e1oEqC=oh+c2h3+hcoch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1273.	nc4h5+ch3=c5h8-13	2.00E+13	0.0	0.0
1274.	sc3h5+c2h3=c5h8-13	1.00E+13	0.0	0.0
1275.	ac3h5+c2h3=c5h8-13	1.00E+13	0.0	0.0
1276.	ic4h5+ch3=c5h8-13	4.80E+37	-7.6	11359.0
1277.	c5h8-13+o2=acrol+ch3hco	2.00E+08	1.5	30200.0
1278.	c5h8-13+ho2=>acrol+c2h4+oh	5.00E+11	0.0	19000.0
1279.	c5h8-13+ho2=>c4h6+ch2o+oh	5.00E+11	0.0	19000.0
1280.	c5h8-13+oh=ch3hco+ac3h5	6.00E+12	0.0	-393.0
1281.	c5h8-13+oh=ch2o+Cc4h7-1	6.00E+12	0.0	-393.0
1282.	c5h8-13+O=acrol+c2h4	4.50E+08	1.4	-858.0
1283.	c5h8-13+O=ch2o+c4h6	4.50E+08	1.4	-858.0
1284.	c5h8-13+H=c5h7+H2	7.00E+06	2.0	0.0
1285.	c5h8-13+H=ac3h5+c2h4	3.35E+08	1.5	2000.0
1286.	c5h8-13+oh=c5h7+h2o	7.00E+06	2.0	0.0
1287.	c5h8-13+ho2=c5h7+h2o2	2.00E+11	0.0	12600.0
1288.	c5h8-13+ch3=c5h7+ch4	2.00E+14	0.0	22800.0
1289.	c5h8-14+oh=c5h7+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
1290.	c5h8-14+H=c5h7+H2	5.50E+04	2.5	-1900.0
1291.	c5h8-14+O=c5h7+oh	9.00E+10	0.7	3250.0
1292.	c5h8-14+ho2=c5h7+h2o2	7.50E+03	2.6	12400.0
1293.	c5h8-14+ch3=c5h7+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
1294.	c5h7+O=acrol+c2h3	2.00E+14	0.0	0.0
1295.	c5h7+H=c5h8-13	1.00E+14	0.0	0.0
1296.	c5h7=CPD+H	2.00E+11	0.0	18000.0
1297.	c5h7+cyc6h12=c5h8-13+cyc6h11	1.00E+12	0.0	10000.0
1298.	nc4h9hco+H=H2+nc4h9co	4.00E+13	0.0	4200.0
1299.	nc4h9hco+oh=h2o+nc4h9co	4.20E+12	0.0	500.0
1300.	nc4h9hco+ho2=h2o2+nc4h9co	1.00E+12	0.0	10000.0
1301.	nc4h9hco+ch3=ch4+nc4h9co	2.00E-06	5.6	2500.0
1302.	nc4h9hco+c2h5=c2h6+nc4h9co	1.30E+12	0.0	8500.0
1303.	nc4h9co=>co+pc4h9	2.00E+13	0.0	28700.0
1304.	nc4h9co+ho2=>co2+oh+pc4h9	2.00E+13	0.0	0.0
1305.	c4h7hco-1+H=H2+c4h7co-1	4.00E+13	0.0	4200.0
1306.	c4h7hco-1+oh=h2o+c4h7co-1	4.20E+12	0.0	500.0
1307.	c4h7hco-1+ho2=h2o2+c4h7co-1	1.00E+12	0.0	10000.0
1308.	c4h7hco-1+ch3=ch4+c4h7co-1	2.00E-06	5.6	2500.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

1309.	c4h7hco-1+c2h5=c2h6+c4h7co-1	1.30E+12	0.0	8500.0
1310.	c4h7co-1=>co+Dc4h7-1	2.00E+13	0.0	28700.0
1311.	c4h7co-1+ho2=>co2+oh+Dc4h7-1	2.00E+13	0.0	0.0
1312.	pentanone+H=H2+Ac5oB	2.70E+07	2.0	5000.0
1313.	pentanone+oh=h2o+Ac5oB	7.80E+06	2.0	-765.0
1314.	pentanone+ho2=h2o2+Ac5oB	1.20E+12	0.0	15500.0
1315.	pentanone+ch3=ch4+Ac5oB	6.00E+11	0.0	9600.0
1316.	pentanone+ch3o2=ch3o2h+Ac5oB	6.00E+11	0.0	9600.0
1317.	pentanone+c2h5=c2h6+Ac5oB	6.00E+11	0.0	11000.0
1318.	pentanone+H=H2+MVK+ch3	2.70E+07	2.0	5000.0
1319.	pentanone+oh=h2o+MVK+ch3	7.80E+06	2.0	-765.0
1320.	pentanone+ho2=h2o2+MVK+ch3	1.20E+12	0.0	15500.0
1321.	pentanone+ch3=ch4+MVK+ch3	6.00E+11	0.0	9600.0
1322.	pentanone+ch3o2=ch3o2h+MVK+ch3	6.00E+11	0.0	9600.0
1323.	pentanone+c2h5=c2h6+MVK+ch3	6.00E+11	0.0	11000.0
1324.	Ac5oB=nc3h7+ch2co	1.23E+18	-1.4	43450.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	11600.0
1325.	Ac5oB+o2=c5oBqjA	1.90E+19	-2.5	0.0
1326.	c5oBqjA=Cc5oBqA	4.60E+11	0.0	22000.0
1327.	Cc5oBqA+o2=>c5oBqAqjC	1.90E+19	0.0	0.0
1328.	c5oBqAqjC=>2oh+choco+ethco	1.00E+16	0.0	43000.0
1329.	Ec5oB+o2=c5oBqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
1330.	c5oBqjE=Cc5oBqE	5.75E+08	1.0	22700.0
1331.	Cc5oBqE+o2=c5oBqEqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
1332.	c5oBqEqjC=>2oh+ch3co+hcoch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1333.	c2h5coc2h4=H+etvinket	1.20E+13	0.0	34500.0
1334.	c2h5coc2h4+o2=ho2+etvinket	1.02E+12	0.0	22654.0
1335.	c2h5coc2h4+o2=c2h5coc2h4qj	1.84E+45	-11.1	6538.0
1336.	c2h5coc2h4qj=ch3chcoc2h4q	9.99E+07	1.0	19700.0
1337.	ch3chcoc2h4q+o2=ch3chqjcoc2h4q	1.84E+45	-11.1	6538.0
1338.	ch3chqjcoc2h4q=>2oh+ch3hco+hcoch2co	1.00E+16	0.0	43000.0
1339.	etvinket=>c2h3+c2h5co	7.94E+17	0.0	84456.0
1340.	etvinket=>c2h3co+c2h5	7.94E+17	0.0	84456.0
1341.	etvinket+ho2=c2h3coc2h4+h2o2	1.10E+11	0.0	17061.0
1342.	etvinket+oh=c2h3coc2h4+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
1343.	etvinket+O=c2h3coc2h4+oh	2.60E+12	0.0	4500.0
1344.	etvinket+H=c2h3coc2h4+H2	1.95E+13	0.0	4445.0
1345.	etvinket+ch3=c2h3coc2h4+ch4	1.00E+11	0.0	17061.0
1346.	c2h3coc2h4=c2h3co+c2h4	5.26E+14	0.4	21460.0
1347.	c2h3coc2h4+oh=divinket+h2o	4.00E+13	0.0	0.0
1348.	c2h3coc2h4+H=divinket+H2	3.16E+13	0.0	0.0
1349.	c2h3coc2h4+ho2=divinket+h2o2	1.80E+12	0.0	0.0
1350.	c2h3coc2h4+ch3=divinket+ch4	7.94E+12	0.0	0.0
1351.	c2h3coc2h4+o2=divinket+ho2	1.02E+12	0.0	22654.0
1352.	c2h3coc2h4=divinket+H	1.00E+14	0.0	44000.0
1353.	c2h3coc2h4+O=c2h3co+ch3hco	2.00E+14	0.0	0.0
1354.	c2h3coc2h4+ho2=c2h3co+ch3hco+oh	1.00E+13	0.0	0.0
1355.	c2h3+c2h3co=divinket	3.12E+14	-0.5	0.0
1356.	Dc5h9-2+H=c2c5h10	1.00E+13	0.0	0.0
1357.	Dc5h9-2+H=t2c5h10	1.00E+13	0.0	0.0
1358.	Dc5h9-2=c5h8-13+H	1.20E+14	0.0	49300.0
1359.	Dc5h9-2+o2=c5h8-13+ho2	1.00E+11	0.0	0.0
1360.	Dc5h9-2+ho2=>ch3hco+sc3h5+oh	1.00E+13	0.0	0.0
1361.	Dc5h9-2+H=c5h8-13+H2	3.16E+12	0.0	0.0
1362.	Dc5h9-2+ch3=c5h8-13+ch4	1.00E+13	0.0	0.0
1363.	Dc5h9-2+c2h3=c5h8-13+c2h4	4.00E+12	0.0	0.0
1364.	Dc5h9-2+c2h5=c5h8-13+c2h6	4.00E+12	0.0	0.0
1365.	Dc5h9-2+ac3h5=c5h8-13+c3h6	4.00E+12	0.0	0.0
1366.	Dc5h9-2+Cc4h7-1=c5h8-13+c4h8	3.16E+12	0.0	0.0
1367.	Ac5h9-1=cyc5h8+H	2.28E+11	0.0	18277.0
1368.	Ac5h9-1+ho2=>nc3h7+ch2co+oh	5.00E+12	0.0	8000.0
1369.	Ec5h9-1=cyc5h8+H	6.90E-03	0.0	-4213.0
1370.	ISOPH=ISOPE+H	1.00E+14	0.0	44000.0
1371.	ISOPH=c2h4+tc3h5	5.00E+13	0.0	38000.0
1372.	ISOPE+ho2=ISOPY+h2o2	2.00E+05	2.6	13910.0
1373.	ISOPE+oh=ISOPY+h2o	2.00E+07	2.0	5000.0
1374.	c4h4+ch3=ISOPY	2.50E+13	0.0	0.0
1375.	ISOPY=c2h3+ac3h4	2.00E+13	0.0	48700.0
1376.	ISOPY+o2=ch2o+ch2coc2h3	3.08E+09	0.4	16910.0
1377.	ic3h7+ic3h7=c6h14	2.30E+12	0.0	0.0
1378.	c6h14+H=>H2+Ac6h13	2.70E+07	2.0	5000.0
1379.	c6h14+oh=>h2o+Ac6h13	7.80E+06	2.0	-765.0
1380.	c6h14+ho2=>h2o2+Ac6h13	1.20E+12	0.0	15500.0
1381.	c6h14+ch3=>ch4+Ac6h13	6.00E+11	0.0	9600.0
1382.	c6h14+ch3o2=>ch3o2h+Ac6h13	4.50E+12	0.0	17500.0
1383.	c6h14+c2h5=>c2h6+Ac6h13	6.00E+11	0.0	11000.0
1384.	Ac6h13=pc4h9+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
1385.	Bc6h13=nc3h7+c3h6	2.00E+13	0.0	28700.0
1386.	Cc6h13=c2h5+c4h8	2.00E+13	0.0	28700.0
1387.	Cc6h13=ch3+c5h10	2.00E+13	0.0	31000.0
1388.	Ac6h13=H+c6h12	3.00E+13	0.0	38000.0
1389.	Bc6h13=H+c6h12	3.00E+13	0.0	38000.0
	Declared duplicate reaction...			
1390.	Bc6h13=H+c6h12	3.00E+13	0.0	39000.0
	Declared duplicate reaction...			
1391.	Cc6h13=H+c6h12	3.00E+13	0.0	38000.0
	Declared duplicate reaction...			
1392.	Cc6h13=H+c6h12	3.00E+13	0.0	38000.0
	Declared duplicate reaction...			
1393.	Ac6h13+o2=c6h12+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
1394.	Bc6h13+o2=c6h12+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
	Declared duplicate reaction...			
1395.	Bc6h13+o2=c6h12+ho2	8.10E+11	0.0	5000.0
	Declared duplicate reaction...			
1396.	Cc6h13+o2=c6h12+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
	Declared duplicate reaction...			
1397.	Cc6h13+o2=c6h12+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
	Declared duplicate reaction...			
1398.	Ac6h13=Bc6h13	7.90E+10	0.0	12000.0
1399.	Ac6h13=Cc6h13	4.60E+11	0.0	17300.0
1400.	Ac6h13+o2=c6h13qjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
1401.	Bc6h13+o2=c6h13qjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
1402.	Cc6h13+o2=c6h13qjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
1403.	Ac6h13+O=Ac5h11+ch2o	1.61E+13	0.0	0.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

1404.	Bc6h13+o2=ch3hco+c4h8+oh	2.10E+11	0.0	6158.0
1405.	Bc6h13+ho2=ch3hco+pc4h9+oh	1.00E+13	0.0	0.0
1406.	Bc6h13+O=ch3hco+pc4h9	1.61E+13	0.0	0.0
1407.	c6h13qjA=c6h12rBqA	3.30E+09	1.0	32500.0
1408.	c6h13qjA=c6h12rCqA	5.70E+08	1.0	25000.0
1409.	c6h13qjA=c6h12rDqA	9.90E+07	1.0	22000.0
1410.	c6h13qjA=c6h12rEqA	1.70E+07	1.0	21000.0
1411.	c6h13qjB=c6h12rAqB	5.00E+09	1.0	35500.0
1412.	c6h13qjB=c6h12rCqB	3.30E+09	1.0	32500.0
1413.	c6h13qjB=c6h12rDqB	5.70E+08	1.0	25000.0
1414.	c6h13qjB=c6h12rEqB	9.90E+07	1.0	22000.0
1415.	c6h13qjB=c6h12rFqB	2.50E+07	1.0	24000.0
1416.	c6h13qjC=c6h12rBqC	3.30E+09	1.0	32500.0
1417.	c6h13qjC=c6h12rAqC	8.60E+08	1.0	28000.0
1418.	c6h13qjC=c6h12rDqC	3.30E+09	1.0	32500.0
1419.	c6h13qjC=c6h12rEqC	5.70E+08	1.0	25000.0
1420.	c6h13qjC=c6h12rFqC	1.50E+08	1.0	25000.0
1421.	c6h13qjA+ho2=nc6h13o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
1422.	c6h13qjB+ho2=nc6h13o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
1423.	c6h13qjC+ho2=nc6h13o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
1424.	c6h12rBqA=c6h12rEqA	5.70E+08	1.0	17300.0
1425.	c6h12rBqA=c6h12rFqA	1.50E+08	1.0	14500.0
1426.	c6h12rCqA=c6h12rFqA	8.60E+08	1.0	19800.0
1427.	c6h12rDqA=c6h12rAqA	5.70E+08	1.0	15300.0
1428.	c6h12rEqA=c6h12rAqA	9.90E+07	1.0	10000.0
1429.	c6h12rFqA=c6h12rAqA	1.70E+07	1.0	15400.0
1430.	c6h12rAqB=c6h12rDqB	5.70E+08	1.0	17300.0
1431.	c6h12rAqB=c6h12rEqB	9.90E+07	1.0	12000.0
1432.	c6h12rAqB=c6h12rFqB	2.50E+07	1.0	19900.0
1433.	c6h12rCqB=c6h12rFqB	8.60E+08	1.0	19800.0
1434.	c6h12rEqB=c6h12rBqB	2.90E+08	1.0	13300.0
1435.	c6h12rFqB=c6h12rBqB	4.90E+07	1.0	8000.0
1436.	c6h12rBqC=>c6h12rEqC	5.70E+08	1.0	17300.0
1437.	c6h12rBqC=c6h12rFqC	1.50E+08	1.0	14500.0
1438.	c6h12rAqC=c6h12rDqC	5.70E+08	1.0	17300.0
1439.	c6h12rAqC=c6h12rEqC	9.90E+07	1.0	12000.0
1440.	c6h12rAqC=>c6h12rFqC	2.50E+07	1.0	19900.0
1441.	c6h12rFqC=c6h12rCqC	2.90E+08	1.0	13300.0
1442.	c6h12rEqC=>c6h12rBqC	5.70E+08	1.0	17300.0
1443.	c6h12rFqC=>c6h12rAqC	2.50E+07	1.0	19900.0
1444.	c6h12rAqA+o2=c6h12qjAqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
1445.	c6h12rBqA+o2=c6h12qjBqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
1446.	c6h12rCqA+o2=c6h12qjCqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
1447.	c6h12rDqA+o2=c6h12qjDqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
1448.	c6h12rEqA+o2=c6h12qjEqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
1449.	c6h12rFqA+o2=c6h12qjFqA	4.82E+36	-8.2	5167.0
1450.	c6h12rAqB+o2=c6h12qjAqB	4.82E+36	-8.2	5167.0
1451.	c6h12rBqB+o2=c6h12qjBqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
1452.	c6h12rCqB+o2=c6h12qjCqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
1453.	c6h12rDqB+o2=c6h12qjDqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
1454.	c6h12rEqB+o2=c6h12qjEqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
1455.	c6h12rFqB+o2=c6h12qjFqB	4.82E+36	-8.2	5167.0
1456.	c6h12rAqC+o2=c6h12qjAqC	4.82E+36	-8.2	{5167.0}
1457.	c6h12rBqC+o2=c6h12qjBqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
1458.	c6h12rCqC+o2=c6h12qjCqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
1459.	c6h12rDqC+o2=c6h12qjDqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
1460.	c6h12rEqC+o2=c6h12qjEqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
1461.	c6h12rFqC+o2=c6h12qjFqC	4.82E+36	-8.2	5167.0
1462.	c6h12rAqC=>oh+c2h4+nc3h7hco	5.00E+13	0.0	25500.0
1463.	c6h12rCqA=>oh+ch2o+c5h10	5.00E+13	0.0	25500.0
1464.	c6h12rDqB=>oh+ch3hco+c4h8	5.00E+13	0.0	25500.0
1465.	c6h12rEqC=>oh+c3h6+ethco	5.00E+13	0.0	25500.0
1466.	c6h12rAqA=oh+c5h11hco	1.00E+09	0.0	7500.0
1467.	c6h12rBqB=oh+hexanone	1.00E+09	0.0	7500.0
1468.	c6h12rCqC=oh+hexanone	1.00E+09	0.0	7500.0
1469.	c6h12rBqA=oh+c6h12o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
1470.	c6h12rCqA=oh+c6h12o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
1471.	c6h12rDqA=oh+c6h12o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
1472.	c6h12rEqA=oh+c6h12o#6	1.70E+08	0.0	1950.0
1473.	c6h12rAqB=oh+c6h12o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
1474.	c6h12rCqB=oh+c6h12o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
1475.	c6h12rDqB=oh+c6h12o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
1476.	c6h12rEqB=oh+c6h12o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
1477.	c6h12rFqB=oh+c6h12o#6	1.70E+08	0.0	1950.0
1478.	c6h12rBqC=oh+c6h12o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
1479.	c6h12rAqC=oh+c6h12o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
1480.	c6h12rDqC=oh+c6h12o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
1481.	c6h12rEqC=oh+c6h12o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
1482.	c6h12rFqC=oh+c6h12o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
1483.	c6h12rBqA=ho2+c6h12	8.50E+12	0.0	26000.0
1484.	c6h12rAqB=ho2+c6h12	8.50E+12	0.0	26000.0
1485.	c6h12rBqC=ho2+c6h12	8.50E+12	0.0	26000.0
1486.	c6h12rCqB=ho2+c6h12	8.50E+12	0.0	26000.0
1487.	c6h12rDqC=ho2+c6h12	8.50E+12	0.0	26000.0
1488.	c6h12qjAqA=oh+c6h11oAqA	7.79E+12	0.0	35000.0
1489.	c6h12qjBqA=oh+c6h11oAqB	2.68E+12	0.0	30500.0
1490.	c6h12qjCqA=oh+c6h11oAqC	4.60E+11	0.0	23000.0
1491.	c6h12qjDqA=oh+c6h11oAqD	7.90E+10	0.0	20000.0
1492.	c6h12qjEqA=oh+c6h11oAqE	1.36E+10	0.0	19000.0
1493.	c6h12qjFqA=oh+c6h11oAqF	2.33E+09	0.0	18000.0
1494.	c6h12qjAqB=oh+c6h11oBqA	1.34E+12	0.0	27500.0
1495.	c6h12qjCqB=oh+c6h11oBqC	1.34E+12	0.0	27500.0
1496.	c6h12qjDqB=oh+c6h11oBqD	2.30E+11	0.0	20000.0
1497.	c6h12qjEqB=oh+c6h11oBqE	3.95E+10	0.0	17000.0
1498.	c6h12qjFqB=oh+c6h11oBqF	6.79E+09	0.0	16000.0
1499.	c6h12qjAqC=oh+c6h11oCqA	2.30E+11	0.0	20000.0
1500.	c6h12qjBqC=oh+c6h11oCqB	1.34E+12	0.0	27500.0
1501.	c6h12qjDqC=oh+c6h11oCqD	1.34E+12	0.0	27500.0
1502.	c6h12qjEqC=oh+c6h11oCqE	2.30E+11	0.0	20000.0
1503.	c6h12qjFqC=oh+c6h11oCqF	3.95E+10	0.0	17000.0
1504.	nc6h13o2h=>oh+ch2o+Ac5h11	1.50E+16	0.0	42000.0
1505.	c6h11o2h=>oh+ch3hco+c2h4+c2h3	1.50E+16	0.0	42000.0
1506.	c6h11oAqA=oh+co2+Ac5h11	1.00E+16	0.0	43000.0
1507.	c6h11oAqB=oh+hco+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

1508.	c6h11oAqB=oh+ch2hco+nc3h7hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1509.	c6h11oAqB=oh+ethco+ch2ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1510.	c6h11oAqE=oh+ch3hco+ch2ch2ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1511.	c6h11oAqF=oh+ch2o+c2h4+ch2ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1512.	c6h11oBqA=oh+ch2o+nc4h9co	1.00E+16	0.0	43000.0
1513.	c6h11oBqC=oh+ch3co+nc3h7hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1514.	c6h11oBqD=oh+ethco+ch2coch3	1.00E+16	0.0	43000.0
1515.	c6h11oBqE=oh+ch3hco+ch3coc2h4	1.00E+16	0.0	43000.0
1516.	c6h11oBqF=oh+ch2o+c2h4+ch2coch3	1.00E+16	0.0	43000.0
1517.	c6h11oCqA=oh+ch2o+Ac5oB	1.00E+16	0.0	43000.0
1518.	c6h11oCqB=oh+ch3hco+c3h7co	1.00E+16	0.0	43000.0
1519.	c6h11oCqD=oh+ethco+c2h5co	1.00E+16	0.0	43000.0
1520.	c6h11oCqE=oh+ch3hco+c2h5coch2	1.00E+16	0.0	43000.0
1521.	c6h11oCqF=oh+ch2o+c2h5coc2h4	1.00E+16	0.0	43000.0
1522.	c6h12o#3+H=>H2+ch2co+c2h5+c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
1523.	c6h12o#3+oh=>h2o+ch2co+c2h5+c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
1524.	c6h12o#3+ho2=>h2o2+ch2co+c2h5+c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
1525.	c6h12o#3+ch3=>ch4+ch2co+c2h5+c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1526.	c6h12o#3+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+c2h5+c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1527.	c6h12o#3+c2h5=>c2h6+ch2co+c2h5+c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
1528.	c6h12o#3+O=>oh+ch2hco+2c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
1529.	c6h12o#4+H=>H2+ch2hco+2c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
1530.	c6h12o#4+oh=>h2o+c2h5co+c3h6	7.80E+06	2.0	-765.0
1531.	c6h12o#4+oh=>h2o+ch3co+c4h8	7.80E+06	2.0	-765.0
1532.	c6h12o#4+ho2=>h2o2+ch2hco+2c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
1533.	c6h12o#4+ch3=>ch4+ch2hco+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1534.	c6h12o#4+ch3o2=>ch3o2h+ch2hco+2c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
1535.	c6h12o#4+c2h5=>c2h6+ch2hco+2c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
1536.	c6h12o#4+O=>oh+ch2hco+2c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
1537.	c6h12o#5+H=>H2+ch2coch3+c3h6	2.70E+07	2.0	5000.0
1538.	c6h12o#5+oh=>h2o+ch2coch3+c3h6	7.80E+06	2.0	-765.0
1539.	c6h12o#5+ho2=>h2o2+ch2coch3+c3h6	1.20E+12	0.0	15500.0
1540.	c6h12o#5+ch3=>ch4+ch2coch3+c3h6	6.00E+11	0.0	9600.0
1541.	c6h12o#5+ch3o2=>ch3o2h+ch2coch3+c3h6	4.50E+12	0.0	17500.0
1542.	c6h12o#5+c2h5=>c2h6+ch2coch3+c3h6	6.00E+11	0.0	11000.0
1543.	c6h12o#5+O=>oh+ch2coch3+c3h6	7.80E+13	0.0	5200.0
1544.	c6h12o#6+H=>H2+ch2hco+2c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
1545.	c6h12o#6+oh=>h2o+ch3coc2h4+c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
1546.	c6h12o#6+oh=>h2o+ch2ch2hco+c3h6	7.80E+06	2.0	-765.0
1547.	c6h12o#6+ho2=>h2o2+ch2hco+2c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
1548.	c6h12o#6+ch3=>ch4+ch2hco+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1549.	c6h12o#6+ch3o2=>ch3o2h+ch2hco+2c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
1550.	c6h12o#6+c2h5=>c2h6+ch2hco+2c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
1551.	c6h12o#6+O=>oh+ch2hco+2c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
1552.	c6h12=nc3h7+ac3h5	2.50E+16	0.0	70000.0
1553.	c2h3+pc4h9=c6h12	1.00E+13	0.0	0.0
1554.	c6h12=c3h6+c3h6	4.00E+12	0.0	57430.0
1555.	Cc6h11-1+H=c6h12	1.00E+13	0.0	0.0
1556.	c6h12+oh=Ac5h11+ch2o	1.00E+11	0.0	-4000.0
1557.	c6h12+O=>ch2hco+pc4h9	3.40E+07	1.8	550.0
1558.	c6h12+O=Ac5h11+hco	1.00E+11	0.0	-1050.0
1559.	c6h12+ho2=h2o2+Cc6h11-1	1.00E+11	0.0	17060.0
1560.	c6h12+O=oh+Cc6h11-1	4.00E+13	0.0	4000.0
1561.	c6h12+H=H2+Cc6h11-1	6.55E+12	0.0	4445.0
1562.	c6h12+oh=h2o+Cc6h11-1	4.19E+06	2.0	-543.0
1563.	c6h12+ch3=ch4+Cc6h11-1	2.00E+11	0.0	6800.0
1564.	c6h12+c2h3=c2h4+Cc6h11-1	2.00E+11	0.0	6800.0
1565.	c6h12+nc3h7=c3h8+Cc6h11-1	2.00E+11	0.0	8300.0
1566.	Dc4h7-1+c2h5=c6h12	1.00E+13	0.0	0.0
1567.	Ec5h9-1+ch3=c6h12	1.00E+13	0.0	0.0
1568.	c6h12+oh=h2o+ch3+c5h8-14	1.99E+06	2.0	-600.0
1569.	c6h12+ho2=h2o2+ch3+c5h8-14	8.00E+12	0.0	17000.0
1570.	c6h12+ch3=ch4+ch3+c5h8-14	8.00E+11	0.0	9500.0
1571.	c6h12+H=H2+ch3+c5h8-14	1.80E+07	2.0	5000.0
1572.	c6h12+O=oh+ch3+c5h8-14	1.13E+03	3.3	1650.0
1573.	c6h12+oh=h2o+ac3h5+c3h6	1.99E+06	2.0	-600.0
1574.	c6h12+ho2=h2o2+ac3h5+c3h6	8.00E+12	0.0	17000.0
1575.	c6h12+ch3=ch4+ac3h5+c3h6	8.00E+11	0.0	9500.0
1576.	c6h12+H=H2+ac3h5+c3h6	1.80E+07	2.0	5000.0
1577.	c6h12+O=oh+ac3h5+c3h6	1.13E+03	3.3	1650.0
1578.	c6h12+oh=h2o+Fc6h11-1	1.41E+07	1.8	974.0
1579.	c6h12+ho2=h2o2+Fc6h11-1	1.20E+13	0.0	19400.0
1580.	c6h12+ch3=ch4+Fc6h11-1	1.30E+12	0.0	11600.0
1581.	c6h12+H=H2+Fc6h11-1	5.70E+07	2.0	7700.0
1582.	c6h12+O=oh+Fc6h11-1	4.36E+06	2.4	5500.0
1583.	Fc6h11-1=Cc6h11-1	2.10E+11	0.0	18100.0
1584.	Cc6h11-1=c2h5+c4h6	4.00E+10	0.0	38250.0
1585.	Cc6h11-1=c5h8-13+ch3	1.00E+12	0.0	50000.0
1586.	Cc6h11-1+ho2=>nc3h7+acrol+oh	1.00E+12	0.0	8000.0
1587.	Cc6h11-1+ho2=>oh+hco+c5h10	7.50E+11	0.0	0.0
1588.	Cc6h11-1+o2=ch2hco+nc3h7hco	3.08E+09	0.4	16910.0
1589.	Fc6h11-1=c2h4+Dc4h7-1	1.00E+12	0.0	35000.0
1590.	cyc6h11=Fc6h11-1	2.00E+13	0.0	30000.0
1591.	c2h4+Ac4h7-1=Ac6h11-3	2.00E+11	0.0	2010.0
1592.	ac3h5+ac3h5=c6h10-15	1.02E+13	0.0	-263.0
1593.	Cc4h7-1+c2h3=c6h10-15	1.00E+12	0.0	0.0
1594.	c6h10-15+o2=c6h9+ho2	1.00E+11	0.0	25050.0
1595.	c6h10-15+ho2=c6h9+h2o2	1.64E+11	0.0	12583.0
1596.	c6h10-15+oh=c6h9+h2o	5.60E+12	0.0	861.0
1597.	c6h10-15+H=c6h9+H2	1.00E+14	0.0	3900.0
1598.	c6h10-15+ch3=c6h9+ch4	2.50E+11	0.0	8300.0
1599.	c6h10-15+c2h5=c6h9+c2h6	1.00E+11	0.0	8300.0
1600.	c6h10-15+c2h3=c6h9+c2h4	6.30E+12	0.0	13000.0
1601.	c6h10-15+ac3h5=c6h9+c3h6	1.00E+12	0.0	10500.0
1602.	c6h10-13=c2h2+c4h8	1.00E+14	0.0	75000.0
1603.	c5h11hco+H=H2+c5h11co	4.00E+13	0.0	4200.0
1604.	c5h11hco+oh=h2o+c5h11co	4.20E+12	0.0	500.0
1605.	c5h11hco+ho2=h2o2+c5h11co	1.00E+12	0.0	10000.0
1606.	c5h11hco+ch3=ch4+c5h11co	2.00E-06	5.6	2500.0
1607.	c5h11hco+c2h5=c2h6+c5h11co	1.30E+12	0.0	8500.0
1608.	c5h11co=>co+Ac5h11	2.00E+13	0.0	28700.0
1609.	c5h11co+ho2=>co2+oh+Ac5h11	2.00E+13	0.0	0.0
1610.	hexanone+H=>H2+ch2co+c2h5+c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
1611.	hexanone+oh=>h2o+ch2co+c2h5+c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

1612.	hexanone+ho2=>h2o2+ch2co+c2h5+c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
1613.	hexanone+ch3=>ch4+ch2co+c2h5+c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1614.	hexanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+c2h5+c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1615.	hexanone+c2h5=>c2h6+ch2co+c2h5+c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
1616.	c6h7C=Lc6h7	2.50E+14	0.7	41800.0
1617.	Lc6h7=c2h2+nc4h5	3.16E+13	0.0	43100.0
1618.	Lc6h7=Lc6h6+H	3.98E+12	0.0	36500.0
1619.	Lc6h7+oh=Lc6h6+h2o	2.00E+07	2.0	1000.0
1620.	Lc6h7+H=Lc6h6+H2	2.00E+07	2.0	1000.0
1621.	Lc6h7+o2=chocho+nc4h5	1.00E+12	0.0	0.0
1622.	Lc6h7+o2=Lc6h6+ho2	1.00E+07	2.0	10000.0
1623.	Lc6h6+o2=>acrol+hco+c2h	2.00E+08	1.5	30200.0
1624.	c6h5=U-c6h5	3.00E+13	0.0	72896.7
1625.	U-c6h5=c2h2+nc4h3	3.16E+13	0.0	43100.0
1626.	U-c6h5=Lc6h4+H	3.98E+12	0.0	36500.0
1627.	Lc6h4+o2=>2hco+2c2h	2.00E+08	1.5	30200.0
1628.	c7h16+H=>H2+ch3+3c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
1629.	c7h16+oh=>h2o+ch3+3c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
1630.	c7h16+ho2=>h2o2+ch3+3c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
1631.	c7h16+ch3=>ch4+ch3+3c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1632.	c7h16+ch3o2=>ch3o2h+ch3+3c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
1633.	c7h16+c2h5=>c2h6+ch3+3c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
1634.	Ac7h15=Ac5h11+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
1635.	Bc7h15=pc4h9+c3h6	2.00E+13	0.0	28700.0
1636.	Cc7h15=nc3h7+c4h8	2.00E+13	0.0	28700.0
1637.	Cc7h15=ch3+c6h12	2.00E+13	0.0	31000.0
1638.	Dc7h15=c2h5+c5h10	4.00E+13	0.0	28700.0
1639.	Ac7h15=H+c7h14	3.00E+13	0.0	38000.0
1640.	Bc7h15=H+c7h14	6.00E+13	0.0	38000.0
1641.	Cc7h15=H+c7h14	6.00E+13	0.0	38000.0
1642.	Dc7h15=H+c7h14	6.00E+13	0.0	38000.0
1643.	Ac7h15+o2=c7h14+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
1644.	Bc7h15+o2=c7h14+ho2	2.70E+12	0.0	5000.0
1645.	Cc7h15+o2=c7h14+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
1646.	Dc7h15+o2=c7h14+ho2	3.90E+12	0.0	5000.0
1647.	Ac7h15=Dc7h15	2.00E+11	0.0	18100.0
1648.	Ac7h15=Cc7h15	2.00E+11	0.0	11100.0
1649.	Ac7h15=Bc7h15	2.00E+11	0.0	18100.0
1650.	Ac7h15+o2=c7h15qjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
1651.	Bc7h15+o2=c7h15qjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
1652.	Cc7h15+o2=c7h15qjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
1653.	Dc7h15+o2=c7h15qjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
1654.	c7h15qjA=c7h14rBqA	3.30E+09	1.0	32500.0
1655.	c7h15qjA=c7h14rCqA	5.70E+08	1.0	25000.0
1656.	c7h15qjA=c7h14rDqA	9.90E+07	1.0	22000.0
1657.	c7h15qjA=c7h14rEqA	1.70E+07	1.0	21000.0
1658.	c7h15qjB=c7h14rAqB	5.00E+09	1.0	35500.0
1659.	c7h15qjB=c7h14rCqB	3.30E+09	1.0	32500.0
1660.	c7h15qjB=c7h14rDqB	5.70E+08	1.0	25000.0
1661.	c7h15qjB=c7h14rEqB	9.90E+07	1.0	22000.0
1662.	c7h15qjB=c7h14rFqB	1.70E+07	1.0	21000.0
1663.	c7h15qjC=c7h14rBqC	3.30E+09	1.0	32500.0
1664.	c7h15qjC=c7h14rAqC	8.60E+08	1.0	28000.0
1665.	c7h15qjC=c7h14rDqC	3.30E+09	1.0	32500.0
1666.	c7h15qjC=c7h14rEqC	5.70E+08	1.0	25000.0
1667.	c7h15qjC=c7h14rFqC	9.90E+07	1.0	22000.0
1668.	c7h15qjC=c7h14rGqC	2.50E+07	1.0	24000.0
1669.	c7h15qjD=c7h14rCqD	6.70E+09	1.0	32500.0
1670.	c7h15qjD=c7h14rBqD	1.10E+09	1.0	25000.0
1671.	c7h15qjD=c7h14rAqD	3.00E+08	1.0	25000.0
1672.	c7h15qjA+ho2=>nc7h15o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
1673.	c7h15qjD+ho2=>nc7h15o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
1674.	c7h15qjC+ho2=>nc7h15o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
1675.	c7h15qjB+ho2=>nc7h15o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
1676.	c7h14rBqA=c7h14rEqA	5.70E+08	1.0	17300.0
1677.	c7h14rBqA=c7h14rFqA	9.90E+07	1.0	12000.0
1678.	c7h14rBqA=c7h14rGqA	2.50E+07	1.0	19900.0
1679.	c7h14rCqA=c7h14rFqA	5.70E+08	1.0	17300.0
1680.	c7h14rCqA=c7h14rGqA	1.50E+08	1.0	14500.0
1681.	c7h14rDqA=c7h14rGqA	8.60E+08	1.0	19800.0
1682.	c7h14rDqA=c7h14rAqA	5.70E+08	1.0	15300.0
1683.	c7h14rEqA=c7h14rAqA	9.90E+07	1.0	10000.0
1684.	c7h14rFqA=c7h14rAqA	1.70E+07	1.0	15400.0
1685.	c7h14rGqA=c7h14rAqA	2.90E+06	1.0	18900.0
1686.	c7h14rAqB=c7h14rDqB	5.70E+08	1.0	17300.0
1687.	c7h14rAqB=c7h14rEqB	9.90E+07	1.0	12000.0
1688.	c7h14rAqB=c7h14rFqB	1.70E+07	1.0	17400.0
1689.	c7h14rAqB=c7h14rGqB	4.40E+06	1.0	23400.0
1690.	c7h14rCqB=c7h14rFqB	5.70E+08	1.0	17300.0
1691.	c7h14rCqB=c7h14rGqB	1.50E+08	1.0	14500.0
1692.	c7h14rDqB=c7h14rGqB	8.60E+08	1.0	19800.0
1693.	c7h14rEqB=c7h14rBqB	2.90E+08	1.0	13300.0
1694.	c7h14rFqB=c7h14rBqB	4.90E+07	1.0	8000.0
1695.	c7h14rGqB=c7h14rBqB	8.50E+06	1.0	13400.0
1696.	c7h14rBqC=c7h14rEqC	5.70E+08	1.0	17300.0
1697.	c7h14rBqC=>c7h14rFqC	9.90E+07	1.0	12000.0
1698.	c7h14rBqC=c7h14rGqC	2.50E+07	1.0	19900.0
1699.	c7h14rAqC=c7h14rDqC	5.70E+08	1.0	17300.0
1700.	c7h14rAqC=c7h14rEqC	9.90E+07	1.0	12000.0
1701.	c7h14rAqC=c7h14rFqC	1.70E+07	1.0	17400.0
1702.	c7h14rAqC=>c7h14rGqC	4.40E+06	1.0	23400.0
1703.	c7h14rDqC=c7h14rGqC	8.60E+08	1.0	19800.0
1704.	c7h14rFqC=c7h14rCqC	2.90E+08	1.0	13300.0
1705.	c7h14rGqC=c7h14rCqC	4.90E+07	1.0	8000.0
1706.	c7h14rGqC=>c7h14rAqC	4.40E+06	1.0	23400.0
1707.	c7h14rFqC=>c7h14rBqC	9.90E+07	1.0	12000.0
1708.	c7h14rCqD=c7h14rBqD	5.70E+08	1.0	17300.0
1709.	c7h14rCqD=c7h14rAqD	1.50E+08	1.0	14500.0
1710.	c7h14rBqD=c7h14rAqD	2.50E+07	1.0	19900.0
1711.	c7h14rAqD=c7h14rDqD	2.90E+08	1.0	13300.0
1712.	c7h14rAqA+o2=c7h14qjAqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
1713.	c7h14rBqA+o2=c7h14qjBqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
1714.	c7h14rCqA+o2=c7h14qjCqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
1715.	c7h14rDqA+o2=c7h14qjDqA	1.84E+45	-11.1	6538.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

1716.	c7h14rEqA+o2=c7h14qjEqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
1717.	c7h14rFqA+o2=c7h14qjFqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
1718.	c7h14rGqA+o2=c7h14qjGqA	4.82E+36	-8.2	5167.0
1719.	c7h14rAqB+o2=c7h14qjAqB	4.82E+36	-8.2	5167.0
1720.	c7h14rBqB+o2=c7h14qjBqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
1721.	c7h14rCqB+o2=c7h14qjCqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
1722.	c7h14rDqB+o2=c7h14qjDqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
1723.	c7h14rEqB+o2=c7h14qjEqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
1724.	c7h14rFqB+o2=c7h14qjFqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
1725.	c7h14rGqB+o2=c7h14qjGqB	4.82E+36	-8.2	5167.0
1726.	c7h14rAqC+o2=c7h14qjAqC	4.82E+36	-8.2	5167.0
1727.	c7h14rBqC+o2=c7h14qjBqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
1728.	c7h14rCqC+o2=c7h14qjCqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
1729.	c7h14rDqC+o2=c7h14qjDqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
1730.	c7h14rEqC+o2=c7h14qjEqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
1731.	c7h14rFqC+o2=c7h14qjFqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
1732.	c7h14rGqC+o2=c7h14qjGqC	4.82E+36	-8.2	5167.0
1733.	c7h14rAqD+o2=c7h14qjAqD	4.82E+36	-8.2	5167.0
1734.	c7h14rBqD+o2=c7h14qjBqD	1.84E+45	-11.1	6538.0
1735.	c7h14rCqD+o2=c7h14qjCqD	1.84E+45	-11.1	6538.0
1736.	c7h14rDqD+o2=c7h14qjDqD	1.84E+45	-11.1	6538.0
1737.	c7h14rAqC=oh+c2h4+nc4h9hco	5.00E+13	0.0	25500.0
1738.	c7h14rCqA=oh+ch2o+c6h12	5.00E+13	0.0	25500.0
1739.	c7h14rBqD=oh+nc3h7hco+c3h6	5.00E+13	0.0	25500.0
1740.	c7h14rDqB=oh+ch3hco+c5h10	5.00E+13	0.0	25500.0
1741.	c7h14rEqC=oh+ethco+c4h8	5.00E+13	0.0	25500.0
1742.	c7h14rAqA=oh+c6h13hco	1.00E+09	0.0	7500.0
1743.	c7h14rBqB=oh+heptanone	1.00E+09	0.0	7500.0
1744.	c7h14rCqC=oh+heptanone	1.00E+09	0.0	7500.0
1745.	c7h14rDqD=oh+heptanone	2.00E+09	0.0	7500.0
1746.	c7h14rBqA=oh+c7h14o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
1747.	c7h14rCqA=oh+c7h14o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
1748.	c7h14rDqA=oh+c7h14o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
1749.	c7h14rEqA=oh+c7h14o#6	1.70E+08	0.0	1950.0
1750.	c7h14rAqB=oh+c7h14o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
1751.	c7h14rCqB=oh+c7h14o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
1752.	c7h14rDqB=oh+c7h14o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
1753.	c7h14rEqB=oh+c7h14o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
1754.	c7h14rFqB=oh+c7h14o#6	1.70E+08	0.0	1950.0
1755.	c7h14rBqC=oh+c7h14o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
1756.	c7h14rAqC=oh+c7h14o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
1757.	c7h14rDqC=oh+c7h14o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
1758.	c7h14rEqC=oh+c7h14o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
1759.	c7h14rFqC=oh+c7h14o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
1760.	c7h14rGqC=oh+c7h14o#6	1.70E+08	0.0	1950.0
1761.	c7h14rCqD=oh+c7h14o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
1762.	c7h14rBqD=oh+c7h14o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
1763.	c7h14rAqD=oh+c7h14o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
1764.	c7h14rAqB=ho2+c7h14	8.50E+12	0.0	26000.0
1765.	c7h14rBqA=ho2+c7h14	8.50E+12	0.0	26000.0
1766.	c7h14rBqC=ho2+c7h14	8.50E+12	0.0	26000.0
1767.	c7h14rCqB=ho2+c7h14	8.50E+12	0.0	26000.0
1768.	c7h14rCqD=ho2+c7h14	8.50E+12	0.0	26000.0
1769.	c7h14rDqC=ho2+c7h14	8.50E+12	0.0	26000.0
1770.	c7h14rBqA=pc4h9+c3h5o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
1771.	c7h14rCqA=nc3h7+c4h7o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
1772.	c7h14rDqA=c2h4o2h+c5h10	2.00E+13	0.0	28700.0
1773.	c7h14rDqA=c2h5+c5h9o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
1774.	c7h14rEqA=c3h6ooh1-3+c4h8	2.00E+13	0.0	28700.0
1775.	c7h14rEqA=ch3+c6h11o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
1776.	c7h14rFqA=c4h8rDqA+c3h6	2.00E+13	0.0	28700.0
1777.	c7h14rGqA=c5h10rEqA+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
1778.	c7h14rBqB=pc4h9+c3h5e1q2	2.00E+13	0.0	28700.0
1779.	c7h14rCqB=nc3h7+c4h7o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
1780.	c7h14rCqB=ch3+c6h11o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
1781.	c7h14rDqB=c2h5+c5h9o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
1782.	c7h14rEqB=c3h6ooh2-1+c4h8	2.00E+13	0.0	28700.0
1783.	c7h14rEqB=ch3+c6h11o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
1784.	c7h14rFqB=c4h8rDqB+c3h6	2.00E+13	0.0	28700.0
1785.	c7h14rGqB=c5h10rEqB+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
1786.	c7h14rAqC=c5h10rAqA+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
1787.	c7h14rBqC=pc4h9+c3h5o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
1788.	c7h14rCqC=ch3+c6h11o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
1789.	c7h14rCqC=nc3h7+c4h7e1qB	2.00E+13	0.0	28700.0
1790.	c7h14rDqC=c2h5+c5h9o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
	Declared duplicate reaction...			
1791.	c7h14rDqC=c2h5+c5h9o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
	Declared duplicate reaction...			
1792.	c7h14rEqC=c3h6ooh1-1+c4h8	2.00E+13	0.0	28700.0
1793.	c7h14rEqC=ch3+c6h11o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
1794.	c7h14rFqC=c4h8rAqB+c3h6	2.00E+13	0.0	28700.0
1795.	c7h14rGqC=c5h10rAqC+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
1796.	c7h14rAqD=c5h10rAqB+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
1797.	c7h14rBqD=c4h8rAqA+c3h6	2.00E+13	0.0	28700.0
1798.	c7h14rCqD=nc3h7+c4h7o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
1799.	c7h14rCqD=ch3+c6h11o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
1800.	c7h14rDqD=c2h5+c5h9o2h	4.00E+13	0.0	28700.0
1801.	c7h14rAqA=H+c7h13o2h	3.00E+13	0.0	38000.0
1802.	c7h14rBqA=H+c7h13o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
1803.	c7h14rCqA=H+c7h13o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
1804.	c7h14rDqA=H+c7h13o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
1805.	c7h14rEqA=H+c7h13o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
1806.	c7h14rFqA=H+c7h13o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
1807.	c7h14rGqA=H+c7h13o2h	3.00E+13	0.0	38000.0
1808.	c7h14rAqB=H+c7h13o2h	1.50E+13	0.0	37500.0
1809.	c7h14rBqB=H+c7h13o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
1810.	c7h14rCqB=H+c7h13o2h	4.50E+13	0.0	38000.0
1811.	c7h14rDqB=H+c7h13o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
1812.	c7h14rEqB=H+c7h13o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
1813.	c7h14rFqB=H+c7h13o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
1814.	c7h14rGqB=H+c7h13o2h	3.00E+13	0.0	38000.0
1815.	c7h14rAqC=H+c7h13o2h	3.00E+13	0.0	38000.0
1816.	c7h14rBqC=H+c7h13o2h	4.50E+13	0.0	38000.0
1817.	c7h14rCqC=H+c7h13o2h	6.00E+13	0.0	38000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

1818.	c7h14rDqC=H+c7h13o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
1819.	c7h14rEqC=H+c7h13o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
1820.	c7h14rFqC=H+c7h13o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
1821.	c7h14rGqC=H+c7h13o2h	3.00E+13	0.0	38000.0
1822.	c7h14rAqD=H+c7h13o2h	3.00E+13	0.0	38000.0
1823.	c7h14rBqD=H+c7h13o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
1824.	c7h14rCqD=H+c7h13o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
1825.	c7h14rDqD=H+c7h13o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
1826.	c7h14rAqA+o2=>c7h13o2h+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
1827.	c7h14rBqA+o2=>c7h13o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
1828.	c7h14rCqA+o2=>c7h13o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
1829.	c7h14rDqA+o2=>c7h13o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
1830.	c7h14rEqA+o2=>c7h13o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
1831.	c7h14rFqA+o2=>c7h13o2h+ho2	2.70E+12	0.0	5000.0
1832.	c7h14rGqA+o2=>c7h13o2h+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
1833.	c7h14rAqB+o2=>c7h13o2h+ho2	6.40E+11	0.0	5000.0
1834.	c7h14rBqB+o2=>c7h13o2h+ho2	2.54E+12	0.0	5000.0
1835.	c7h14rCqB+o2=>c7h13o2h+ho2	2.54E+12	0.0	5000.0
1836.	c7h14rDqB+o2=>c7h13o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
1837.	c7h14rEqB+o2=>c7h13o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
1838.	c7h14rFqB+o2=>c7h13o2h+ho2	2.70E+12	0.0	5000.0
1839.	c7h14rGqB+o2=>c7h13o2h+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
1840.	c7h14rAqC+o2=>c7h13o2h+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
1841.	c7h14rBqC+o2=>c7h13o2h+ho2	1.45E+12	0.0	5000.0
1842.	c7h14rCqC+o2=>c7h13o2h+ho2	3.90E+12	0.0	5000.0
1843.	c7h14rDqC+o2=>c7h13o2h+ho2	2.54E+12	0.0	5000.0
1844.	c7h14rEqC+o2=>c7h13o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
1845.	c7h14rFqC+o2=>c7h13o2h+ho2	2.70E+12	0.0	5000.0
1846.	c7h14rGqC+o2=>c7h13o2h+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
1847.	c7h14rAqD+o2=>c7h13o2h+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
1848.	c7h14rBqD+o2=>c7h13o2h+ho2	2.70E+12	0.0	5000.0
1849.	c7h14rCqD+o2=>c7h13o2h+ho2	2.54E+12	0.0	5000.0
1850.	c7h14rDqD+o2=>c7h13o2h+ho2	3.90E+12	0.0	5000.0
1851.	c7h14qjAqA=>oh+c7h13oAqA	7.90E+12	0.0	35000.0
1852.	c7h14qjBqA=>oh+c7h13oAqB	1.34E+12	0.0	27500.0
1853.	c7h14qjCqA=>oh+c7h13oAqC	2.30E+11	0.0	20000.0
1854.	c7h14qjDqA=>oh+c7h13oAqD	3.95E+10	0.0	17000.0
1855.	c7h14qjEqA=>oh+c7h13oAqE	6.79E+09	0.0	16000.0
1856.	c7h14qjFqA=>oh+c7h13oAqF	1.17E+09	0.0	15000.0
1857.	c7h14qjGqA=>oh+c7h13oAqG	2.00E+08	0.0	14200.0
1858.	c7h14qjAqB=>oh+c7h13oBqA	1.34E+12	0.0	27500.0
1859.	c7h14qjCqB=>oh+c7h13oBqC	1.34E+12	0.0	27500.0
1860.	c7h14qjDqB=>oh+c7h13oBqD	2.30E+11	0.0	20000.0
1861.	c7h14qjEqB=>oh+c7h13oBqE	3.95E+10	0.0	17000.0
1862.	c7h14qjFqB=>oh+c7h13oBqF	6.79E+09	0.0	35500.0
1863.	c7h14qjGqB=>oh+c7h13oBqG	1.17E+09	0.0	32500.0
1864.	c7h14qjAqC=>oh+c7h13oCqA	2.30E+11	0.0	20000.0
1865.	c7h14qjBqC=>oh+c7h13oCqB	1.34E+12	0.0	27500.0
1866.	c7h14qjDqC=>oh+c7h13oCqD	1.34E+12	0.0	27500.0
1867.	c7h14qjEqC=>oh+c7h13oCqE	2.30E+11	0.0	20000.0
1868.	c7h14qjFqC=>oh+c7h13oCqF	3.95E+10	0.0	17000.0
1869.	c7h14qjGqC=>oh+c7h13oCqG	6.79E+09	0.0	16000.0
1870.	c7h14qjAqD=>oh+c7h13oDqA	3.95E+10	0.0	17000.0
1871.	c7h14qjBqD=>oh+c7h13oDqB	2.30E+11	0.0	20000.0
1872.	c7h14qjCqD=>oh+c7h13oDqC	1.34E+12	0.0	27500.0
1873.	nc7h15o2h=>oh+ch2o+Ac6h13	1.50E+16	0.0	42000.0
1874.	c7h13o2h=>oh+ch2o+2c2h4+c2h3	1.50E+16	0.0	42000.0
1875.	c7h13oAqA=>oh+co2+Ac6h13	1.00E+16	0.0	43000.0
1876.	c7h13oAqB=>oh+hco+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1877.	c7h13oAqC=>oh+ch2hco+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1878.	c7h13oAqD=>oh+nc3h7hco+ch2ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1879.	c7h13oAqE=>oh+ethco+ch2ch2ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1880.	c7h13oAqF=>oh+ch3hco+c2h4+ch2ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1881.	c7h13oAqG=>oh+ch2o+2c2h4+ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1882.	c7h13oBqA=>oh+ch2o+c5h11co	1.00E+16	0.0	43000.0
1883.	c7h13oBqC=>oh+ch3co+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1884.	c7h13oBqD=>oh+nc3h7hco+ch2coch3	1.00E+16	0.0	43000.0
1885.	c7h13oBqE=>oh+ch3coc2h4+ethco	1.00E+16	0.0	43000.0
1886.	c7h13oBqF=>oh+ch3hco+c2h4+ch2coch3	1.00E+16	0.0	43000.0
1887.	c7h13oBqG=>oh+ch2o+c2h4+ch3coc2h4	1.00E+16	0.0	43000.0
1888.	c7h13oCqA=>oh+ch2o+ch2co+pc4h9	1.00E+16	0.0	43000.0
1889.	c7h13oCqB=>oh+ch3hco+nc4h9co	1.00E+16	0.0	43000.0
1890.	c7h13oCqD=>oh+c2h5co+nc3h7hco	1.00E+16	0.0	43000.0
1891.	c7h13oCqE=>oh+c2h5coch2+ethco	1.00E+16	0.0	43000.0
1892.	c7h13oCqF=>oh+ch3hco+c2h5coc2h4	1.00E+16	0.0	43000.0
1893.	c7h13oCqG=>oh+ch2o+c2h4+c2h5coch2	1.00E+16	0.0	43000.0
1894.	c7h13oDqA=>oh+ch2o+c2h4+c3h7co	1.00E+16	0.0	43000.0
1895.	c7h13oDqB=>oh+ch3hco+ch2co+nc3h7	1.00E+16	0.0	43000.0
1896.	c7h13oDqC=>oh+ethco+c3h7co	1.00E+16	0.0	43000.0
1897.	c7h14o#3+H=>H2+ch2co+ch3+2c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
1898.	c7h14o#3+oh=>h2o+ch2co+ch3+2c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
1899.	c7h14o#3+ho2=>h2o2+ch2co+ch3+2c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
1900.	c7h14o#3+ch3=>ch4+ch2co+ch3+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1901.	c7h14o#3+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1902.	c7h14o#3+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3+2c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
1903.	c7h14o#3+O=>oh+hco+3c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
1904.	c7h14o#4+H=>H2+hco+3c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
1905.	c7h14o#4+oh=>h2o+hco+3c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
1906.	c7h14o#4+ho2=>h2o2+hco+3c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
1907.	c7h14o#4+ch3=>ch4+hco+3c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1908.	c7h14o#4+ch3o2=>ch3o2h+hco+3c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
1909.	c7h14o#4+c2h5=>c2h6+hco+3c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
1910.	c7h14o#4+O=>oh+hco+3c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
1911.	c7h14o#5+H=>H2+c2h5coch2+c3h6	1.35E+07	2.0	5000.0
1912.	c7h14o#5+H=>H2+ch2coch3+c4h8	1.35E+07	2.0	5000.0
1913.	c7h14o#5+oh=>h2o+c2h5coch2+c3h6	3.90E+06	2.0	-765.0
1914.	c7h14o#5+oh=>h2o+ch2coch3+c4h8	3.90E+06	2.0	-765.0
1915.	c7h14o#5+ho2=>h2o2+c2h5coch2+c3h6	6.00E+11	0.0	15500.0
1916.	c7h14o#5+ho2=>h2o2+ch2coch3+c4h8	6.00E+11	0.0	15500.0
1917.	c7h14o#5+ch3=>ch4+c2h5coch2+c3h6	3.00E+11	0.0	9600.0
1918.	c7h14o#5+ch3=>ch4+ch2coch3+c4h8	3.00E+11	0.0	9600.0
1919.	c7h14o#5+ch3o2=>ch3o2h+c2h5coch2+c3h6	2.25E+12	0.0	17500.0
1920.	c7h14o#5+ch3o2=>ch3o2h+ch2coch3+c4h8	2.25E+12	0.0	17500.0
1921.	c7h14o#5+c2h5=>c2h6+c2h5coch2+c3h6	3.00E+11	0.0	11000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

1922.	c7h14o#5+c2h5=>c2h6+ch2coch3+c4h8	3.00E+11	0.0	11000.0
1923.	c7h14o#5+O=>oh+c2h5coch2+c3h6	3.90E+13	0.0	5200.0
1924.	c7h14o#5+O=>oh+ch2coch3+c4h8	3.90E+13	0.0	5200.0
1925.	c7h14o#6+H=>H2+hco+3c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
1926.	c7h14o#6+oh=>h2o+hco+3c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
1927.	c7h14o#6+ho2=>h2o2+hco+3c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
1928.	c7h14o#6+ch3=>ch4+hco+3c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1929.	c7h14o#6+ch3o2=>ch3o2h+hco+3c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
1930.	c7h14o#6+c2h5=>c2h6+hco+3c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
1931.	c7h14o#6+O=>oh+hco+3c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
1932.	c7h14=pc4h9+ac3h5	2.50E+16	0.0	70000.0
1933.	c2h3+Ac5h11=c7h14	1.00E+13	0.0	0.0
1934.	c7h14=c3h6+c4h8	4.00E+12	0.0	57430.0
1935.	Cc7h13-1+H=c7h14	1.00E+13	0.0	0.0
1936.	c7h14+oh=>ch3+c5h11hco	1.00E+12	0.0	0.0
1937.	c7h14+oh=>ch2o+Ac6h13	1.00E+12	0.0	0.0
1938.	c7h14+O=>ch2co+ch3+H+2c2h4	3.40E+07	1.8	550.0
1939.	c7h14+ho2=>oh+c7h14o#3	1.00E+12	0.0	14400.0
1940.	Ec5h9-1+c2h5=c7h14	1.00E+13	0.0	0.0
1941.	c7h14+ho2=h2o2+Cc7h13-1	1.00E+11	0.0	17060.0
1942.	c7h14+O=oh+Cc7h13-1	4.00E+13	0.0	4000.0
1943.	c7h14+H=H2+Cc7h13-1	6.55E+12	0.0	4445.0
1944.	c7h14+oh=h2o+Cc7h13-1	4.19E+06	2.0	-543.0
1945.	c7h14+ch3=ch4+Cc7h13-1	2.00E+11	0.0	6800.0
1946.	c7h14+c2h3=c2h4+Cc7h13-1	2.00E+11	0.0	6800.0
1947.	c7h14+nc3h7=c3h8+Cc7h13-1	2.00E+11	0.0	8300.0
1948.	Cc7h13-1=nc3h7+c4h6	1.00E+11	0.0	37000.0
1949.	Cc7h13-1+ho2=>pc4h9+acrol+oh	1.00E+12	0.0	8000.0
1950.	c6h13hco+H=H2+c6h13co	4.00E+13	0.0	4200.0
1951.	c6h13hco+oh=h2o+c6h13co	4.20E+12	0.0	500.0
1952.	c6h13hco+ho2=h2o2+c6h13co	1.00E+12	0.0	10000.0
1953.	c6h13hco+ch3=ch4+c6h13co	2.00E-06	5.6	2500.0
1954.	c6h13hco+c2h5=c2h6+c6h13co	1.30E+12	0.0	8500.0
1955.	c6h13co=>co+Ac6h13	2.00E+13	0.0	28700.0
1956.	c6h13co+ho2=>co2+oh+Ac6h13	2.00E+13	0.0	0.0
1957.	heptanone+H=>H2+ch2co+ch3+2c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
1958.	heptanone+oh=>h2o+ch2co+ch3+2c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
1959.	heptanone+ho2=>h2o2+ch2co+ch3+2c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
1960.	heptanone+ch3=>ch4+ch2co+ch3+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1961.	heptanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1962.	heptanone+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3+2c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
1963.	c6h11hco=Fc6h11-1+hco	7.25E+16	0.0	82400.0
1964.	c6h11hco+o2=c6h11co+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0
1965.	c6h11hco+ho2=c6h11co+h2o2	1.70E+12	0.0	10700.0
1966.	c6h11hco+oh=c6h11co+h2o	2.35E+10	0.7	-1113.0
1967.	c6h11hco+O=c6h11co+oh	5.85E+12	0.0	1808.0
1968.	c6h11hco+H=c6h11co+H2	5.54E+02	3.5	5167.0
1969.	c6h11hco+ch3=c6h11co+ch4	2.25E+00	4.0	8285.0
1970.	c6h11hco+c2h5=c6h11co+c2h6	1.64E+00	3.6	9141.0
1971.	c6h11hco+hco=c6h11co+ch2o	4.70E+04	2.7	18235.0
1972.	c6h11hco+c2h3=c6h11co+c2h4	8.50E+09	0.0	6000.0
1973.	c6h11co=Fc6h11-1+co	2.00E+13	0.0	28700.0
1974.	MHD=>Cc4h7-1+ac3h5	5.00E+15	0.0	72800.0
1975.	MHD=>ch3+c6h9	5.00E+16	0.0	73000.0
1976.	P2c4h614=P2c4h513+H	4.26E+13	0.0	38600.0
1977.	P2c4h513=>ISOPY+c2h5	1.00E+16	0.0	71000.0
1978.	P2c4h513+H=P2c4h4134+H2	6.55E+12	0.0	4445.0
1979.	P2c4h513+oh=P2c4h4134+h2o	3.00E+12	0.0	1230.0
1980.	P2c4h513+ho2=P2c4h4134+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
1981.	P2c4h513+o2=P2c4h4134+ho2	4.00E+12	0.0	40000.0
1982.	P2c4h513+ch3=P2c4h4134+ch4	2.00E+11	0.0	6800.0
1983.	P2c4h4134=>c2h3+c5h8-12	1.00E+11	0.0	37000.0
1984.	c5h8-12=>c3h3+c2h5	2.00E+15	0.0	75000.0
1985.	c5h8-12=c5h8-13	2.50E+13	0.0	63000.0
1986.	Ac7h13-3=c2h4+Ac5h9-1	1.00E+11	0.0	37000.0
1987.	Ac7h13-3=c7h12-13+H	4.26E+13	0.0	38600.0
1988.	Dc7h13-1=c2h3+c5h10	1.00E+11	0.0	37000.0
1989.	Dc7h13-1=c7h12-13+H	4.26E+13	0.0	38600.0
1990.	c7h12-16=ac3h5+Dc4h7-1	1.00E+16	0.0	71000.0
1991.	c7h12-13=c5h7+c2h5	1.00E+16	0.0	71000.0
1992.	c8h18+H=>H2+c2h5+3c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
1993.	c8h18+oh=>h2o+c2h5+3c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
1994.	c8h18+ho2=>h2o2+c2h5+3c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
1995.	c8h18+ch3=>ch4+c2h5+3c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
1996.	c8h18+ch3o2=>ch3o2h+c2h5+3c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
1997.	c8h18+c2h5=>c2h6+c2h5+3c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
1998.	Ac8h17=Ac6h13+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
1999.	Dc8h17=nc3h7+c5h10	2.00E+13	0.0	28700.0
2000.	Dc8h17=c2h5+c6h12	2.00E+13	0.0	28700.0
2001.	Cc8h17=pc4h9+c4h8	2.00E+13	0.0	28700.0
2002.	Cc8h17=ch3+c7h14	2.00E+13	0.0	31000.0
2003.	Bc8h17=Ac5h11+c3h6	2.00E+13	0.0	28700.0
2004.	Ac8h17=H+c8h16	3.00E+13	0.0	38000.0
2005.	Dc8h17=H+c8h16	3.00E+13	0.0	38000.0
	Declared duplicate reaction...			
2006.	Dc8h17=H+c8h16	3.00E+13	0.0	38000.0
	Declared duplicate reaction...			
2007.	Cc8h17=H+c8h16	3.00E+13	0.0	38000.0
	Declared duplicate reaction...			
2008.	Cc8h17=H+c8h16	3.00E+13	0.0	38000.0
	Declared duplicate reaction...			
2009.	Bc8h17=H+c8h16	3.00E+13	0.0	38000.0
	Declared duplicate reaction...			
2010.	Bc8h17=H+c8h16	3.00E+13	0.0	39000.0
	Declared duplicate reaction...			
2011.	Ac8h17+o2=c8h16+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2012.	Dc8h17+o2=c8h16+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
	Declared duplicate reaction...			
2013.	Dc8h17+o2=c8h16+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
	Declared duplicate reaction...			
2014.	Cc8h17+o2=c8h16+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
	Declared duplicate reaction...			
2015.	Cc8h17+o2=c8h16+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
	Declared duplicate reaction...			

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

2016.	Bc8h17+o2=c8h16+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
	Declared duplicate reaction...			
2017.	Bc8h17+o2=c8h16+ho2	8.10E+11	0.0	5000.0
	Declared duplicate reaction...			
2018.	Bc8h17=Dc8h17	2.00E+11	0.0	18100.0
2019.	Ac8h17=Dc8h17	2.00E+11	0.0	11100.0
	Declared duplicate reaction...			
2020.	Ac8h17=Dc8h17	2.00E+11	0.0	18100.0
	Declared duplicate reaction...			
2021.	Bc8h17=Cc8h17	2.00E+11	0.0	11100.0
2022.	Ac8h17=Cc8h17	2.00E+11	0.0	18100.0
2023.	Ac8h17+o2=c8h17qjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
2024.	Bc8h17+o2=c8h17qjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
2025.	Cc8h17+o2=c8h17qjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
2026.	Dc8h17+o2=c8h17qjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
2027.	c8h17qjA=c8h16rBqA	3.30E+09	1.0	32500.0
2028.	c8h17qjA=c8h16rCqA	5.70E+08	1.0	25000.0
2029.	c8h17qjA=c8h16rDqA	9.90E+07	1.0	22000.0
2030.	c8h17qjA=c8h16rEqA	1.70E+07	1.0	21000.0
2031.	c8h17qjB=c8h16rAqB	5.00E+09	1.0	35500.0
2032.	c8h17qjB=c8h16rCqB	3.30E+09	1.0	32500.0
2033.	c8h17qjB=c8h16rDqB	5.70E+08	1.0	25000.0
2034.	c8h17qjB=c8h16rEqB	9.90E+07	1.0	22000.0
2035.	c8h17qjB=c8h16rFqB	1.70E+07	1.0	21000.0
2036.	c8h17qjC=c8h16rBqC	3.30E+09	1.0	32500.0
2037.	c8h17qjC=c8h16rAqC	8.60E+08	1.0	28000.0
2038.	c8h17qjC=c8h16rDqC	3.30E+09	1.0	32500.0
2039.	c8h17qjC=c8h16rEqC	5.70E+08	1.0	25000.0
2040.	c8h17qjC=c8h16rFqC	9.90E+07	1.0	22000.0
2041.	c8h17qjC=c8h16rGqC	1.70E+07	1.0	21000.0
2042.	c8h17qjD=c8h16rCqD	3.30E+09	1.0	32500.0
2043.	c8h17qjD=c8h16rBqD	5.70E+08	1.0	25000.0
2044.	c8h17qjD=c8h16rAqD	1.50E+08	1.0	25000.0
2045.	c8h17qjD=c8h16rEqD	3.30E+09	1.0	32500.0
2046.	c8h17qjD=c8h16rFqD	5.70E+08	1.0	25000.0
2047.	c8h17qjD=c8h16rGqD	9.90E+07	1.0	22000.0
2048.	c8h17qjD=c8h16rHqD	2.50E+07	1.0	24000.0
2049.	c8h17qjA+ho2=nc8h17o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
2050.	c8h17qjB+ho2=nc8h17o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
2051.	c8h17qjC+ho2=nc8h17o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
2052.	c8h17qjD+ho2=nc8h17o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
2053.	c8h16rBqA=c8h16rEqA	5.70E+08	1.0	17300.0
2054.	c8h16rBqA=c8h16rFqA	9.90E+07	1.0	12000.0
2055.	c8h16rBqA=c8h16rGqA	1.70E+07	1.0	17400.0
2056.	c8h16rBqA=c8h16rHqA	4.40E+06	1.0	23400.0
2057.	c8h16rCqA=c8h16rFqA	5.70E+08	1.0	17300.0
2058.	c8h16rCqA=c8h16rGqA	9.90E+07	1.0	12000.0
2059.	c8h16rCqA=c8h16rHqA	2.50E+07	1.0	19900.0
2060.	c8h16rDqA=c8h16rAqA	5.70E+08	1.0	15300.0
2061.	c8h16rDqA=c8h16rGqA	5.70E+08	1.0	17300.0
2062.	c8h16rDqA=c8h16rHqA	1.50E+08	1.0	14500.0
2063.	c8h16rEqA=c8h16rHqA	8.60E+08	1.0	19800.0
2064.	c8h16rEqA=c8h16rAqA	9.90E+07	1.0	10000.0
2065.	c8h16rFqA=c8h16rAqA	1.70E+07	1.0	15400.0
2066.	c8h16rGqA=c8h16rAqA	2.90E+06	1.0	18900.0
2067.	c8h16rAqB=c8h16rDqB	5.70E+08	1.0	17300.0
2068.	c8h16rAqB=c8h16rEqB	9.90E+07	1.0	12000.0
2069.	c8h16rAqB=c8h16rFqB	1.70E+07	1.0	17400.0
2070.	c8h16rAqB=c8h16rGqB	2.90E+06	1.0	20900.0
2071.	c8h16rCqB=c8h16rFqB	5.70E+08	1.0	17300.0
2072.	c8h16rCqB=c8h16rGqB	9.90E+07	1.0	12000.0
2073.	c8h16rCqB=c8h16rHqB	2.50E+07	1.0	19900.0
2074.	c8h16rDqB=c8h16rGqB	5.70E+08	1.0	17300.0
2075.	c8h16rDqB=c8h16rHqB	1.50E+08	1.0	14500.0
2076.	c8h16rEqB=c8h16rHqB	8.60E+08	1.0	19800.0
2077.	c8h16rEqB=c8h16rBqB	2.90E+08	1.0	13300.0
2078.	c8h16rFqB=c8h16rBqB	4.90E+07	1.0	8000.0
2079.	c8h16rGqB=c8h16rBqB	8.50E+06	1.0	13400.0
2080.	c8h16rHqB=c8h16rBqB	1.50E+06	1.0	16900.0
2081.	c8h16rBqC=c8h16rEqC	5.70E+08	1.0	17300.0
2082.	c8h16rBqC=c8h16rFqC	9.90E+07	1.0	12000.0
2083.	c8h16rBqC=>c8h16rGqC	1.70E+07	1.0	17400.0
2084.	c8h16rBqC=c8h16rHqC	4.40E+06	1.0	23400.0
2085.	c8h16rAqC=c8h16rDqC	5.70E+08	1.0	17300.0
2086.	c8h16rAqC=c8h16rEqC	9.90E+07	1.0	12000.0
2087.	c8h16rAqC=c8h16rFqC	1.70E+07	1.0	17400.0
2088.	c8h16rAqC=c8h16rGqC	2.90E+06	1.0	20900.0
2089.	c8h16rDqC=c8h16rGqC	5.70E+08	1.0	17300.0
2090.	c8h16rDqC=c8h16rHqC	1.50E+08	1.0	14500.0
2091.	c8h16rEqC=c8h16rHqC	8.60E+08	1.0	19800.0
2092.	c8h16rFqC=c8h16rCqC	2.90E+08	1.0	13300.0
2093.	c8h16rGqC=>c8h16rBqC	1.70E+07	1.0	17400.0
2094.	c8h16rGqC=c8h16rCqC	4.90E+07	1.0	8000.0
2095.	c8h16rHqC=c8h16rCqC	8.50E+06	1.0	13400.0
2096.	c8h16rCqD=>c8h16rFqD	5.70E+08	1.0	17300.0
2097.	c8h16rCqD=c8h16rGqD	9.90E+07	1.0	12000.0
2098.	c8h16rCqD=c8h16rHqD	2.50E+07	1.0	19900.0
2099.	c8h16rBqD=c8h16rEqD	5.70E+08	1.0	17300.0
2100.	c8h16rBqD=c8h16rFqD	9.90E+07	1.0	12000.0
2101.	c8h16rBqD=>c8h16rGqD	1.70E+07	1.0	17400.0
2102.	c8h16rBqD=c8h16rHqD	4.40E+06	1.0	23400.0
2103.	c8h16rAqD=c8h16rDqD	2.90E+08	1.0	13300.0
2104.	c8h16rAqD=c8h16rEqD	9.90E+07	1.0	12000.0
2105.	c8h16rAqD=c8h16rFqD	1.70E+07	1.0	17400.0
2106.	c8h16rAqD=c8h16rGqD	2.90E+06	1.0	20900.0
2107.	c8h16rEqD=c8h16rHqD	8.60E+08	1.0	19800.0
2108.	c8h16rFqD=>c8h16rCqD	5.70E+08	1.0	17300.0
2109.	c8h16rGqD=>c8h16rBqD	1.70E+07	1.0	17400.0
2110.	c8h16rGqD=c8h16rDqD	2.90E+08	1.0	13300.0
2111.	c8h16rHqD=c8h16rDqD	4.90E+07	1.0	8000.0
2112.	c8h16rAqA+o2=c8h16qjAqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
2113.	c8h16rBqA+o2=c8h16qjBqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
2114.	c8h16rCqA+o2=c8h16qjCqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
2115.	c8h16rDqA+o2=c8h16qjDqA	1.84E+45	-11.1	6538.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

2116.	c8h16rEqA+o2=c8h16qjEqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
2117.	c8h16rFqA+o2=c8h16qjFqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
2118.	c8h16rGqA+o2=c8h16qjGqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
2119.	c8h16rHqA+o2=c8h16qjHqA	4.82E+36	-8.2	5167.0
2120.	c8h16rAqB+o2=c8h16qjAqB	4.82E+36	-8.2	5167.0
2121.	c8h16rBqB+o2=c8h16qjBqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
2122.	c8h16rCqB+o2=c8h16qjCqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
2123.	c8h16rDqB+o2=c8h16qjDqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
2124.	c8h16rEqB+o2=c8h16qjEqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
2125.	c8h16rFqB+o2=c8h16qjFqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
2126.	c8h16rGqB+o2=c8h16qjGqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
2127.	c8h16rHqB+o2=c8h16qjHqB	4.82E+36	-8.2	5167.0
2128.	c8h16rAqC+o2=c8h16qjAqC	4.82E+36	-8.2	5167.0
2129.	c8h16rBqC+o2=c8h16qjBqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
2130.	c8h16rCqC+o2=c8h16qjCqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
2131.	c8h16rDqC+o2=c8h16qjDqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
2132.	c8h16rEqC+o2=c8h16qjEqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
2133.	c8h16rFqC+o2=c8h16qjFqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
2134.	c8h16rGqC+o2=c8h16qjGqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
2135.	c8h16rHqC+o2=c8h16qjHqC	4.82E+36	-8.2	5167.0
2136.	c8h16rAqD+o2=c8h16qjAqD	4.82E+36	-8.2	5167.0
2137.	c8h16rBqD+o2=c8h16qjBqD	1.84E+45	-11.1	6538.0
2138.	c8h16rCqD+o2=c8h16qjCqD	1.84E+45	-11.1	6538.0
2139.	c8h16rDqD+o2=c8h16qjDqD	1.84E+45	-11.1	6538.0
2140.	c8h16rEqD+o2=c8h16qjEqD	1.84E+45	-11.1	6538.0
2141.	c8h16rFqD+o2=c8h16qjFqD	1.84E+45	-11.1	6538.0
2142.	c8h16rGqD+o2=c8h16qjGqD	1.84E+45	-11.1	6538.0
2143.	c8h16rHqD+o2=c8h16qjHqD	4.82E+36	-8.2	5167.0
2144.	c8h16rAqC=>oh+c2h4+c5h11hco	5.00E+13	0.0	25500.0
2145.	c8h16rCqA=>oh+ch2o+c7h14	5.00E+13	0.0	25500.0
2146.	c8h16rBqD=>oh+c3h6+nc4h9hco	5.00E+13	0.0	25500.0
2147.	c8h16rDqB=>oh+c6h12+ch3hco	5.00E+13	0.0	25500.0
2148.	c8h16rFqD=>oh+c4h8+nc3h7hco	5.00E+13	0.0	25500.0
2149.	c8h16rEqC=>oh+ethco+c5h10	5.00E+13	0.0	25500.0
2150.	c8h16rAqA=>oh+c7h15hco	1.00E+09	0.0	7500.0
2151.	c8h16rBqB=>oh+octanone	1.00E+09	0.0	7500.0
2152.	c8h16rCqC=>oh+octanone	1.00E+09	0.0	7500.0
2153.	c8h16rDqD=>oh+octanone	1.00E+09	0.0	7500.0
2154.	c8h16rBqA=oh+c8h16o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
2155.	c8h16rCqA=oh+c8h16o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
2156.	c8h16rDqA=oh+c8h16o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
2157.	c8h16rEqA=oh+c8h16o#6	1.70E+08	0.0	1950.0
2158.	c8h16rAqB=oh+c8h16o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
2159.	c8h16rCqB=oh+c8h16o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
2160.	c8h16rDqB=oh+c8h16o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
2161.	c8h16rEqB=oh+c8h16o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
2162.	c8h16rFqB=oh+c8h16o#6	1.70E+08	0.0	1950.0
2163.	c8h16rBqC=oh+c8h16o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
2164.	c8h16rAqC=oh+c8h16o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
2165.	c8h16rDqC=oh+c8h16o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
2166.	c8h16rEqC=oh+c8h16o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
2167.	c8h16rFqC=oh+c8h16o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
2168.	c8h16rGqC=oh+c8h16o#6	1.70E+08	0.0	1950.0
2169.	c8h16rCqD=oh+c8h16o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
2170.	c8h16rBqD=oh+c8h16o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
2171.	c8h16rAqD=oh+c8h16o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
2172.	c8h16rEqD=oh+c8h16o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
2173.	c8h16rFqD=oh+c8h16o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
2174.	c8h16rGqD=oh+c8h16o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
2175.	c8h16rHqD=oh+c8h16o#6	1.70E+08	0.0	1950.0
2176.	c8h16rAqB=ho2+c8h16	8.50E+12	0.0	26000.0
2177.	c8h16rBqA=ho2+c8h16	8.50E+12	0.0	26000.0
2178.	c8h16rBqC=ho2+c8h16	8.50E+12	0.0	26000.0
2179.	c8h16rCqB=ho2+c8h16	8.50E+12	0.0	26000.0
2180.	c8h16rCqD=ho2+c8h16	8.50E+12	0.0	26000.0
2181.	c8h16rDqC=ho2+c8h16	8.50E+12	0.0	26000.0
2182.	c8h16rEqD=ho2+c8h16	8.50E+12	0.0	26000.0
2183.	c8h16rBqA=Ac5h11+c3h5o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
2184.	c8h16rCqA=pc4h9+c4h7o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
2185.	c8h16rDqA=c2h4o2h+c6h12	2.00E+13	0.0	28700.0
2186.	c8h16rDqA=nc3h7+c5h9o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
2187.	c8h16rEqA=c3h6ooh1-3+c5h10	2.00E+13	0.0	28700.0
2188.	c8h16rEqA=c2h5+c6h11o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
2189.	c8h16rFqA=c4h8rDqA+c4h8	2.00E+13	0.0	28700.0
2190.	c8h16rFqA=ch3+c7h13o2h	2.00E+13	0.0	31000.0
2191.	c8h16rGqA=c5h10rEqA+c3h6	2.00E+13	0.0	28700.0
2192.	c8h16rHqA=c6h12rFqA+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
2193.	c8h16rCqB=pc4h9+c4h7o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
2194.	c8h16rCqB=ch3+c7h13o2h	2.00E+13	0.0	31000.0
2195.	c8h16rDqB=nc3h7+c5h9o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
2196.	c8h16rEqB=c3h6ooh2-1+c5h10	2.00E+13	0.0	28700.0
2197.	c8h16rEqB=c2h5+c6h11o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
2198.	c8h16rFqB=c4h8rDqB+c4h8	2.00E+13	0.0	28700.0
2199.	c8h16rFqB=ch3+c7h13o2h	2.00E+13	0.0	31000.0
2200.	c8h16rGqB=c5h10rEqB+c3h6	2.00E+13	0.0	28700.0
2201.	c8h16rHqB=c6h12rFqB+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
2202.	c8h16rBqB=Ac5h11+c3h5e1q2	2.00E+13	0.0	28700.0
2203.	c8h16rBqC=Ac5h11+c3h5o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
2204.	c8h16rAqC=c6h12rAqA+c2h4	2.00E+13	0.0	27700.0
2205.	c8h16rDqC=nc3h7+c5h9o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
2206.	c8h16rDqC=c2h5+c6h11o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
2207.	c8h16rEqC=c3h6ooh1-1+c5h10	2.00E+13	0.0	27700.0
2208.	c8h16rEqC=c2h5+c6h11o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
2209.	c8h16rFqC=c4h8rAqB+c4h8	2.00E+13	0.0	28700.0
2210.	c8h16rFqC=ch3+c7h13o2h	2.00E+13	0.0	31000.0
2211.	c8h16rGqC=c5h10rAqC+c3h6	2.00E+13	0.0	28700.0
2212.	c8h16rHqC=c6h12rFqC+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
2213.	c8h16rCqC=ch3+c7h13o2h	2.00E+13	0.0	31000.0
2214.	c8h16rCqC=pc4h9+c4h7e1qB	2.00E+13	0.0	28700.0
2215.	c8h16rCqD=pc4h9+c4h7o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
2216.	c8h16rCqD=ch3+c7h13o2h	2.00E+13	0.0	31000.0
2217.	c8h16rBqD=c5h10rAqA+c3h6	2.00E+13	0.0	27700.0
2218.	c8h16rAqD=c6h12rAqB+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
2219.	c8h16rEqD=nc3h7+c5h9o2h	2.00E+13	0.0	28700.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

2220.	c8h16rEqD=c2h5+c6h11o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
2221.	c8h16rFqD=c4h8rAqA+c4h8	2.00E+13	0.0	27700.0
2222.	c8h16rFqD=ch3+c7h13o2h	2.00E+13	0.0	31000.0
2223.	c8h16rGqD=c5h10rAqB+c3h6	2.00E+13	0.0	28700.0
2224.	c8h16rHqD=c6h12rAqC+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
2225.	c8h16rDqD=nc3h7+c5h9o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
2226.	c8h16rDqD=c2h5+c6h11o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
2227.	c8h16rBqA=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2228.	c8h16rCqA=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2229.	c8h16rDqA=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2230.	c8h16rEqA=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2231.	c8h16rFqA=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2232.	c8h16rGqA=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2233.	c8h16rHqA=H+c8h15o2h	3.00E+13	0.0	38000.0
2234.	c8h16rAqA=H+c8h15o2h	3.00E+13	0.0	38000.0
2235.	c8h16rCqD=H+c8h15o2h	4.50E+13	0.0	38000.0
2236.	c8h16rBqD=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2237.	c8h16rAqD=H+c8h15o2h	3.00E+13	0.0	38000.0
2238.	c8h16rEqD=H+c8h15o2h	4.50E+13	0.0	38000.0
2239.	c8h16rFqD=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2240.	c8h16rGqD=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2241.	c8h16rHqD=H+c8h15o2h	3.00E+13	0.0	38000.0
2242.	c8h16rDqD=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2243.	c8h16rBqC=H+c8h15o2h	4.50E+13	0.0	38000.0
2244.	c8h16rAqC=H+c8h15o2h	3.00E+13	0.0	38000.0
2245.	c8h16rDqC=H+c8h15o2h	4.50E+13	0.0	38000.0
2246.	c8h16rEqC=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2247.	c8h16rFqC=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2248.	c8h16rGqC=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2249.	c8h16rHqC=H+c8h15o2h	3.00E+13	0.0	38000.0
2250.	c8h16rCqC=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2251.	c8h16rAqB=H+c8h15o2h	1.50E+13	0.0	37500.0
2252.	c8h16rCqB=H+c8h15o2h	4.50E+13	0.0	38000.0
2253.	c8h16rDqB=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2254.	c8h16rEqB=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2255.	c8h16rFqB=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2256.	c8h16rGqB=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2257.	c8h16rHqB=H+c8h15o2h	3.00E+13	0.0	38000.0
2258.	c8h16rBqB=H+c8h15o2h	6.00E+13	0.0	38000.0
2259.	c8h16rBqA+o2=c8h15o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
2260.	c8h16rCqA+o2=c8h15o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
2261.	c8h16rDqA+o2=c8h15o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
2262.	c8h16rEqA+o2=c8h15o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
2263.	c8h16rFqA+o2=c8h15o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
2264.	c8h16rGqA+o2=c8h15o2h+ho2	2.70E+12	0.0	5000.0
2265.	c8h16rHqA+o2=c8h15o2h+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2266.	c8h16rAqA+o2=c8h15o2h+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2267.	c8h16rAqB+o2=c8h15o2h+ho2	6.40E+11	0.0	5000.0
2268.	c8h16rCqB+o2=c8h15o2h+ho2	2.54E+12	0.0	5000.0
2269.	c8h16rDqB+o2=c8h15o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
2270.	c8h16rEqB+o2=c8h15o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
2271.	c8h16rFqB+o2=c8h15o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
2272.	c8h16rGqB+o2=c8h15o2h+ho2	2.70E+12	0.0	5000.0
2273.	c8h16rHqB+o2=c8h15o2h+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2274.	c8h16rBqB+o2=c8h15o2h+ho2	2.70E+12	0.0	5000.0
2275.	c8h16rBqC+o2=c8h15o2h+ho2	1.45E+12	0.0	5000.0
2276.	c8h16rAqC+o2=c8h15o2h+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2277.	c8h16rDqC+o2=c8h15o2h+ho2	2.54E+12	0.0	5000.0
2278.	c8h16rEqC+o2=c8h15o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
2279.	c8h16rFqC+o2=c8h15o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
2280.	c8h16rGqC+o2=c8h15o2h+ho2	2.70E+12	0.0	5000.0
2281.	c8h16rHqC+o2=c8h15o2h+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2282.	c8h16rCqC+o2=c8h15o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
2283.	c8h16rCqD+o2=c8h15o2h+ho2	2.54E+12	0.0	5000.0
2284.	c8h16rBqD+o2=c8h15o2h+ho2	2.70E+12	0.0	5000.0
2285.	c8h16rAqD+o2=c8h15o2h+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2286.	c8h16rEqD+o2=c8h15o2h+ho2	2.54E+12	0.0	5000.0
2287.	c8h16rFqD+o2=c8h15o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
2288.	c8h16rGqD+o2=c8h15o2h+ho2	2.70E+12	0.0	5000.0
2289.	c8h16rHqD+o2=c8h15o2h+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2290.	c8h16rDqD+o2=c8h15o2h+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
2291.	c8h16qjBqA=oh+c8h15oq	3.30E+09	1.0	30500.0
2292.	c8h16qjCqA=oh+c8h15oq	5.70E+08	1.0	23000.0
2293.	c8h16qjDqA=oh+c8h15oq	9.90E+07	1.0	20000.0
2294.	c8h16qjEqA=oh+c8h15oq	1.70E+07	1.0	19000.0
2295.	c8h16qjFqA=oh+c8h15oq	1.70E+07	1.0	21000.0
2296.	c8h16qjGqA=oh+c8h15oq	1.70E+07	1.0	21000.0
2297.	c8h16qjAqA=oh+c8h15oq	3.30E+09	1.0	32500.0
2298.	c8h16qjCqD=oh+c8h15oq	1.70E+09	1.0	27500.0
2299.	c8h16qjBqD=oh+c8h15oq	2.90E+08	1.0	20000.0
2300.	c8h16qjAqD=oh+c8h15oq	4.90E+07	1.0	17000.0
2301.	c8h16qjEqD=oh+c8h15oq	1.70E+09	1.0	27500.0
2302.	c8h16qjFqD=oh+c8h15oq	2.90E+08	1.0	20000.0
2303.	c8h16qjGqD=oh+c8h15oq	4.90E+07	1.0	17000.0
2304.	c8h16qjHqD=oh+c8h15oq	8.50E+06	1.0	16000.0
2305.	c8h16qjDqD=oh+c8h15oq	3.30E+09	1.0	32500.0
2306.	c8h16qjBqC=oh+c8h15oq	1.70E+09	1.0	27500.0
2307.	c8h16qjAqC=oh+c8h15oq	2.90E+08	1.0	20000.0
2308.	c8h16qjDqC=oh+c8h15oq	1.70E+09	1.0	27500.0
2309.	c8h16qjEqC=oh+c8h15oq	2.90E+08	1.0	20000.0
2310.	c8h16qjFqC=oh+c8h15oq	4.90E+07	1.0	17000.0
2311.	c8h16qjGqC=oh+c8h15oq	8.50E+06	1.0	16000.0
2312.	c8h16qjCqC=oh+c8h15oq	3.30E+09	1.0	32500.0
2313.	c8h16qjAqB=oh+c8h15oq	1.70E+09	1.0	27500.0
2314.	c8h16qjCqB=oh+c8h15oq	1.70E+09	1.0	27500.0
2315.	c8h16qjDqB=oh+c8h15oq	2.90E+08	1.0	20000.0
2316.	c8h16qjEqB=oh+c8h15oq	4.90E+07	1.0	17000.0
2317.	c8h16qjFqB=oh+c8h15oq	8.50E+06	1.0	16000.0
2318.	nc8h17o2h=>oh+ch3hco+2c2h4+c2h5	1.50E+16	0.0	42000.0
2319.	c8h15o2h=>oh+ch3hco+2c2h4+c2h3	1.50E+16	0.0	42000.0
2320.	c8h15oq=>oh+ch2ch2hco+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
2321.	c8h15oq=>oh+choch2ch2cho+pc4h9	1.00E+16	0.0	43000.0
2322.	c8h15oq=>oh+ch2hco+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
2323.	c8h15oq=>oh+hcoch2hco+Ac5h11	1.00E+16	0.0	43000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

2324.	c8h15oq=>oh+ch3hco+ch2co+pc4h9	1.00E+16	0.0	43000.0
2325.	c8h15oq=>oh+ethco+Ac5oB	1.00E+16	0.0	43000.0
2326.	c8h15oq=>oh+c2h4+ch3hco+c3h7co	1.00E+16	0.0	43000.0
2327.	c8h16o#3+H=>H2+ch2co+c2h5+2c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
2328.	c8h16o#3+oh=>h2o+ch2co+c2h5+2c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
2329.	c8h16o#3+ho2=>h2o2+ch2co+c2h5+2c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
2330.	c8h16o#3+ch3=>ch4+ch2co+c2h5+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
2331.	c8h16o#3+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+c2h5+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
2332.	c8h16o#3+c2h5=>c2h6+ch2co+c2h5+2c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
2333.	c8h16o#3+O=>oh+ch2hco+3c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
2334.	c8h16o#4+H=>H2+ch2hco+3c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
2335.	c8h16o#4+oh=>h2o+ch2hco+3c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
2336.	c8h16o#4+ho2=>h2o2+ch2hco+3c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
2337.	c8h16o#4+ch3=>ch4+ch2hco+3c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
2338.	c8h16o#4+ch3o2=>ch3o2h+ch2hco+3c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
2339.	c8h16o#4+c2h5=>c2h6+ch2hco+3c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
2340.	c8h16o#4+O=>oh+ch2hco+3c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
2341.	c8h16o#5+H=>H2+ch2hco+3c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
2342.	c8h16o#5+oh=>h2o+c6h12+ch2hco	7.80E+06	2.0	-765.0
2343.	c8h16o#5+oh=>h2o+ch2co+pc4h9+c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
2344.	c8h16o#5+oh=>h2o+c5h10+ch2coch3	7.80E+06	2.0	-765.0
2345.	c8h16o#5+oh=>h2o+c3h6+Ac5oB	7.80E+06	2.0	-765.0
2346.	c8h16o#5+ho2=>h2o2+ch2hco+3c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
2347.	c8h16o#5+ch3=>ch4+ch2hco+3c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
2348.	c8h16o#5+ch3o2=>ch3o2h+ch2hco+3c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
2349.	c8h16o#5+c2h5=>c2h6+ch2hco+3c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
2350.	c8h16o#5+O=>oh+ch2hco+3c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
2351.	c8h16o#6+H=>H2+ch2hco+3c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
2352.	c8h16o#6+oh=>h2o+ch2hco+3c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
2353.	c8h16o#6+ho2=>h2o2+ch2hco+3c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
2354.	c8h16o#6+ch3=>ch4+ch2hco+3c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
2355.	c8h16o#6+ch3o2=>ch3o2h+ch2hco+3c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
2356.	c8h16o#6+c2h5=>c2h6+ch2hco+3c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
2357.	c8h16o#6+O=>oh+ch2hco+3c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
2358.	c8h16+ch3=Ac6h13+c3h6	9.60E+10	0.0	8000.0
2359.	c8h16+oh=ch3+c6h13hco	1.00E+12	0.0	0.0
2360.	c8h16+oh=ch2o+Ac7h15	1.00E+12	0.0	0.0
2361.	c8h16+O=ch2co+c2h5+H+2c2h4	3.40E+07	1.8	550.0
2362.	c8h16+ho2=oh+c8h16o#3	1.00E+12	0.0	14400.0
2363.	c8h16+ho2=h2o2+Cc8h15-1	1.00E+11	0.0	17060.0
2364.	c8h16+O=oh+Cc8h15-1	4.00E+13	0.0	4000.0
2365.	c8h16+H=H2+Cc8h15-1	6.55E+12	0.0	4445.0
2366.	c8h16+oh=h2o+Cc8h15-1	4.19E+06	2.0	-543.0
2367.	c8h16+ch3=ch4+Cc8h15-1	2.00E+11	0.0	6800.0
2368.	c8h16+c2h3=c2h4+Cc8h15-1	2.00E+11	0.0	6800.0
2369.	c8h16+nc3h7=c3h8+Cc8h15-1	2.00E+11	0.0	8300.0
2370.	Cc8h15-1=c4h6+pc4h9	2.50E+13	0.0	45000.0
2371.	Cc8h15-1+H=c8h16	1.00E+13	0.0	0.0
2372.	Cc8h15-1+ho2=>oh+acrol+Ac5h11	1.00E+12	0.0	8000.0
2373.	ac3h5+Ec5h9-1=c8h14	1.00E+13	0.0	0.0
2374.	Dc4h7-1+Dc4h7-1=c8h14	1.00E+13	0.0	0.0
2375.	c7h15hco+H=H2+c7h15co	4.00E+13	0.0	4200.0
2376.	c7h15hco+oh=h2o+c7h15co	4.20E+12	0.0	500.0
2377.	c7h15hco+ho2=h2o2+c7h15co	1.00E+12	0.0	10000.0
2378.	c7h15hco+ch3=ch4+c7h15co	2.00E-06	5.6	2500.0
2379.	c7h15hco+c2h5=c2h6+c7h15co	1.30E+12	0.0	8500.0
2380.	c7h15co=>co+Ac7h15	2.00E+13	0.0	28700.0
2381.	c7h15co+ho2=>co2+oh+Ac7h15	2.00E+13	0.0	0.0
2382.	octanone+H=>H2+ch2co+c2h5+2c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
2383.	octanone+oh=>h2o+ch2co+c2h5+2c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
2384.	octanone+ho2=>h2o2+ch2co+c2h5+2c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
2385.	octanone+ch3=>ch4+ch2co+c2h5+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
2386.	octanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+c2h5+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
2387.	octanone+c2h5=>c2h6+ch2co+c2h5+2c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
2388.	Hc8h15-1=Fc6h11-1+c2h4	2.00E+13	0.0	29400.0
2389.	c9h20+H=>H2+ch3+4c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
2390.	c9h20+oh=>h2o+ch3+4c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
2391.	c9h20+ho2=>h2o2+ch3+4c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
2392.	c9h20+ch3=>ch4+ch3+4c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
2393.	c9h20+ch3o2=>ch3o2h+ch3+4c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
2394.	c9h20+c2h5=>c2h6+ch3+4c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
2395.	Ac9h19=Ac7h15+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
2396.	Bc9h19=Ac6h13+c3h6	2.00E+13	0.0	28700.0
2397.	Cc9h19=Ac5h11+c4h8	2.00E+13	0.0	28700.0
2398.	Cc9h19=ch3+c8h16	2.00E+13	0.0	31000.0
2399.	Dc9h19=pc4h9+c5h10	2.00E+13	0.0	28700.0
2400.	Dc9h19=c2h5+c7h14	2.00E+13	0.0	29700.0
2401.	Ec9h19=nc3h7+c6h12	4.00E+13	0.0	28700.0
2402.	Ac9h19=H+c9h18	3.00E+13	0.0	38000.0
2403.	Bc9h19=H+c9h18	3.00E+13	0.0	38000.0
	Declared duplicate reaction...			
2404.	Bc9h19=H+c9h18	3.00E+13	0.0	39000.0
	Declared duplicate reaction...			
2405.	Cc9h19=H+c9h18	6.00E+13	0.0	38000.0
2406.	Dc9h19=H+c9h18	6.00E+13	0.0	38000.0
2407.	Ec9h19=H+c9h18	6.00E+13	0.0	38000.0
2408.	Ac9h19+o2=c9h18+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2409.	Bc9h19+o2=c9h18+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
	Declared duplicate reaction...			
2410.	Bc9h19+o2=c9h18+ho2	8.10E+11	0.0	5000.0
	Declared duplicate reaction...			
2411.	Cc9h19+o2=c9h18+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
2412.	Dc9h19+o2=c9h18+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
2413.	Ec9h19+o2=c9h18+ho2	3.90E+12	0.0	5000.0
2414.	Ac9h19=Dc9h19	4.00E+11	0.0	18100.0
2415.	Bc9h19=Ec9h19	2.00E+11	0.0	18100.0
2416.	Ac9h19=Ec9h19	2.00E+11	0.0	11100.0
2417.	Bc9h19=Dc9h19	2.00E+11	0.0	11100.0
2418.	Bc9h19=Cc9h19	2.00E+11	0.0	18100.0
2419.	Ac9h19+o2=c9h19qjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
2420.	Bc9h19+o2=c9h19qjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
2421.	Cc9h19+o2=c9h19qjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
2422.	Dc9h19+o2=c9h19qjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
2423.	Ec9h19+o2=c9h19qjE	1.84E+45	-11.1	6538.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

2424.	c9h19qjA=c9h18rBqA	3.30E+09	1.0	32500.0
2425.	c9h19qjA=c9h18rCqA	5.70E+08	1.0	25000.0
2426.	c9h19qjA=c9h18rDqA	9.90E+07	1.0	22000.0
2427.	c9h19qjA=c9h18rEqA	1.70E+07	1.0	21000.0
2428.	c9h19qjB=c9h18rAqB	5.00E+09	1.0	35500.0
2429.	c9h19qjB=c9h18rCqB	3.30E+09	1.0	32500.0
2430.	c9h19qjB=c9h18rDqB	5.70E+08	1.0	25000.0
2431.	c9h19qjB=c9h18rEqB	9.90E+07	1.0	22000.0
2432.	c9h19qjB=c9h18rFqB	1.70E+07	1.0	21000.0
2433.	c9h19qjC=c9h18rBqC	3.30E+09	1.0	32500.0
2434.	c9h19qjC=c9h18rAqC	8.60E+08	1.0	28000.0
2435.	c9h19qjC=c9h18rDqC	3.30E+09	1.0	32500.0
2436.	c9h19qjC=c9h18rEqC	5.70E+08	1.0	25000.0
2437.	c9h19qjC=c9h18rFqC	9.90E+07	1.0	22000.0
2438.	c9h19qjC=c9h18rGqC	1.70E+07	1.0	21000.0
2439.	c9h19qjD=c9h18rCqD	3.30E+09	1.0	32500.0
2440.	c9h19qjD=c9h18rBqD	5.70E+08	1.0	25000.0
2441.	c9h19qjD=c9h18rAqD	1.50E+08	1.0	25000.0
2442.	c9h19qjD=c9h18rEqD	3.30E+09	1.0	32500.0
2443.	c9h19qjD=c9h18rFqD	5.70E+08	1.0	25000.0
2444.	c9h19qjD=c9h18rGqD	9.90E+07	1.0	22000.0
2445.	c9h19qjD=c9h18rHqD	1.70E+07	1.0	21000.0
2446.	c9h19qjE=c9h18rDqE	6.70E+09	1.0	32500.0
2447.	c9h19qjE=c9h18rCqE	1.10E+09	1.0	25000.0
2448.	c9h19qjE=c9h18rBqE	2.00E+08	1.0	22000.0
2449.	c9h19qjE=c9h18rAqE	5.10E+07	1.0	24000.0
2450.	c9h19qjA+ho2=c9h19o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
2451.	c9h19qjD+ho2=c9h19o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
2452.	c9h19qjE+ho2=c9h19o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
2453.	c9h19qjC+ho2=c9h19o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
2454.	c9h19qjB+ho2=c9h19o2h+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
2455.	c9h18rBqA=c9h18rEqA	5.70E+08	1.0	17300.0
2456.	c9h18rBqA=c9h18rFqA	9.90E+07	1.0	12000.0
2457.	c9h18rBqA=c9h18rGqA	1.70E+07	1.0	17400.0
2458.	c9h18rBqA=c9h18rHqA	2.90E+06	1.0	20900.0
2459.	c9h18rCqA=c9h18rFqA	5.70E+08	1.0	17300.0
2460.	c9h18rCqA=c9h18rGqA	9.90E+07	1.0	12000.0
2461.	c9h18rCqA=c9h18rHqA	1.70E+07	1.0	17400.0
2462.	c9h18rCqA=c9h18rIqA	4.40E+06	1.0	23400.0
2463.	c9h18rDqA=c9h18rAqA	5.70E+08	1.0	15300.0
2464.	c9h18rDqA=c9h18rGqA	5.70E+08	1.0	17300.0
2465.	c9h18rDqA=c9h18rHqA	9.90E+07	1.0	12000.0
2466.	c9h18rDqA=c9h18rIqA	2.50E+07	1.0	19900.0
2467.	c9h18rEqA=c9h18rHqA	5.70E+08	1.0	17300.0
2468.	c9h18rEqA=c9h18rIqA	1.50E+08	1.0	14500.0
2469.	c9h18rEqA=c9h18rAqA	9.90E+07	1.0	10000.0
2470.	c9h18rFqA=c9h18rIqA	8.60E+08	1.0	19800.0
2471.	c9h18rFqA=c9h18rAqA	1.70E+07	1.0	15400.0
2472.	c9h18rGqA=c9h18rAqA	2.90E+06	1.0	18900.0
2473.	c9h18rAqB=c9h18rDqB	5.70E+08	1.0	17300.0
2474.	c9h18rAqB=c9h18rEqB	9.90E+07	1.0	12000.0
2475.	c9h18rAqB=c9h18rFqB	1.70E+07	1.0	17400.0
2476.	c9h18rAqB=c9h18rGqB	2.90E+06	1.0	20900.0
2477.	c9h18rCqB=>c9h18rFqB	5.70E+08	1.0	17300.0
2478.	c9h18rCqB=>c9h18rGqB	9.90E+07	1.0	12000.0
2479.	c9h18rCqB=c9h18rHqB	1.70E+07	1.0	17400.0
2480.	c9h18rCqB=c9h18rIqB	4.40E+06	1.0	23400.0
2481.	c9h18rDqB=>c9h18rGqB	5.70E+08	1.0	17300.0
2482.	c9h18rDqB=c9h18rHqB	9.90E+07	1.0	12000.0
2483.	c9h18rDqB=c9h18rIqB	2.50E+07	1.0	19900.0
2484.	c9h18rEqB=c9h18rHqB	5.70E+08	1.0	17300.0
2485.	c9h18rEqB=c9h18rIqB	1.50E+08	1.0	14500.0
2486.	c9h18rEqB=c9h18rBqB	2.90E+08	1.0	13300.0
2487.	c9h18rFqB=>c9h18rCqB	5.70E+08	1.0	17300.0
2488.	c9h18rFqB=c9h18rIqB	8.60E+08	1.0	19800.0
2489.	c9h18rFqB=c9h18rBqB	4.90E+07	1.0	8000.0
2490.	c9h18rGqB=c9h18rBqB	8.50E+06	1.0	13400.0
2491.	c9h18rGqB=>c9h18rCqB	9.90E+07	1.0	12000.0
2492.	c9h18rGqB=>c9h18rDqB	5.70E+08	1.0	17300.0
2493.	c9h18rHqB=c9h18rBqB	1.50E+06	1.0	16900.0
2494.	c9h18rBqC=c9h18rEqC	5.70E+08	1.0	17300.0
2495.	c9h18rBqC=c9h18rFqC	9.90E+07	1.0	12000.0
2496.	c9h18rBqC=c9h18rGqC	1.70E+07	1.0	17400.0
2497.	c9h18rBqC=>c9h18rHqC	2.90E+06	1.0	20900.0
2498.	c9h18rAqC=c9h18rDqC	5.70E+08	1.0	17300.0
2499.	c9h18rAqC=c9h18rEqC	9.90E+07	1.0	12000.0
2500.	c9h18rAqC=c9h18rFqC	1.70E+07	1.0	17400.0
2501.	c9h18rAqC=c9h18rGqC	2.90E+06	1.0	20900.0
2502.	c9h18rDqC=>c9h18rGqC	5.70E+08	1.0	17300.0
2503.	c9h18rDqC=c9h18rHqC	9.90E+07	1.0	12000.0
2504.	c9h18rDqC=c9h18rIqC	2.50E+07	1.0	19900.0
2505.	c9h18rEqC=c9h18rHqC	5.70E+08	1.0	17300.0
2506.	c9h18rEqC=c9h18rIqC	1.50E+08	1.0	14500.0
2507.	c9h18rFqC=c9h18rIqC	8.60E+08	1.0	19800.0
2508.	c9h18rFqC=c9h18rCqC	2.90E+08	1.0	13300.0
2509.	c9h18rGqC=c9h18rCqC	4.90E+07	1.0	8000.0
2510.	c9h18rGqC=>c9h18rDqC	5.70E+08	1.0	17300.0
2511.	c9h18rHqC=>c9h18rBqC	2.90E+06	1.0	20900.0
2512.	c9h18rHqC=c9h18rCqC	8.50E+06	1.0	13400.0
2513.	c9h18rIqC=c9h18rCqC	1.50E+06	1.0	16900.0
2514.	c9h18rCqD=>c9h18rFqD	5.70E+08	1.0	17300.0
2515.	c9h18rCqD=>c9h18rGqD	9.90E+07	1.0	12000.0
2516.	c9h18rCqD=c9h18rHqD	1.70E+07	1.0	17400.0
2517.	c9h18rCqD=c9h18rIqD	4.40E+06	1.0	23400.0
2518.	c9h18rBqD=c9h18rEqD	5.70E+08	1.0	17300.0
2519.	c9h18rBqD=c9h18rFqD	9.90E+07	1.0	12000.0
2520.	c9h18rBqD=c9h18rGqD	1.70E+07	1.0	17400.0
2521.	c9h18rBqD=>c9h18rHqD	2.90E+06	1.0	20900.0
2522.	c9h18rAqD=c9h18rDqD	2.90E+08	1.0	13300.0
2523.	c9h18rAqD=c9h18rEqD	9.90E+07	1.0	12000.0
2524.	c9h18rAqD=c9h18rFqD	1.70E+07	1.0	17400.0
2525.	c9h18rAqD=c9h18rGqD	2.90E+06	1.0	20900.0
2526.	c9h18rEqD=c9h18rHqD	5.70E+08	1.0	17300.0
2527.	c9h18rEqD=c9h18rIqD	1.50E+08	1.0	14500.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

2528.	c9h18rFqD=>c9h18rCqD	5.70E+08	1.0	17300.0
2529.	c9h18rFqD=c9h18rIqD	8.60E+08	1.0	19800.0
2530.	c9h18rGqD=>c9h18rCqD	9.90E+07	1.0	12000.0
2531.	c9h18rGqD=c9h18rDqD	2.90E+08	1.0	13300.0
2532.	c9h18rHqD=>c9h18rBqD	2.90E+06	1.0	20900.0
2533.	c9h18rHqD=c9h18rDqD	4.90E+07	1.0	8000.0
2534.	c9h18rIqD=c9h18rDqD	8.50E+06	1.0	13400.0
2535.	c9h18rDqE=c9h18rAqE	8.60E+08	1.0	19800.0
2536.	c9h18rDqE=>c9h18rCqE	5.70E+08	1.0	17300.0
2537.	c9h18rDqE=c9h18rBqE	9.90E+07	1.0	12000.0
2538.	c9h18rCqE=>c9h18rDqE	5.70E+08	1.0	17300.0
2539.	c9h18rCqE=c9h18rBqE	1.70E+07	1.0	17400.0
2540.	c9h18rCqE=c9h18rAqE	4.40E+06	1.0	23400.0
2541.	c9h18rBqE=c9h18rEqE	2.90E+08	1.0	13300.0
2542.	c9h18rAqE=c9h18rEqE	4.90E+07	1.0	8000.0
2543.	c9h18rBqA+o2=c9h18qjBqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
2544.	c9h18rCqA+o2=c9h18qjCqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
2545.	c9h18rDqA+o2=c9h18qjDqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
2546.	c9h18rEqA+o2=c9h18qjEqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
2547.	c9h18rFqA+o2=c9h18qjFqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
2548.	c9h18rGqA+o2=c9h18qjGqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
2549.	c9h18rHqA+o2=c9h18qjHqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
2550.	c9h18rIqA+o2=c9h18qjIqA	4.82E+36	-8.2	5167.0
2551.	c9h18rAqA+o2=c9h18qjAqA	1.84E+45	-11.1	6538.0
2552.	c9h18rAqB+o2=c9h18qjAqB	4.82E+36	-8.2	5167.0
2553.	c9h18rCqB+o2=c9h18qjCqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
2554.	c9h18rDqB+o2=c9h18qjDqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
2555.	c9h18rEqB+o2=c9h18qjEqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
2556.	c9h18rFqB+o2=c9h18qjFqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
2557.	c9h18rGqB+o2=c9h18qjGqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
2558.	c9h18rHqB+o2=c9h18qjHqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
2559.	c9h18rIqB+o2=c9h18qjIqB	4.82E+36	-8.2	5167.0
2560.	c9h18rBqB+o2=c9h18qjBqB	1.84E+45	-11.1	6538.0
2561.	c9h18rBqC+o2=c9h18qjBqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
2562.	c9h18rAqC+o2=c9h18qjAqC	4.82E+36	-8.2	5167.0
2563.	c9h18rDqC+o2=c9h18qjDqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
2564.	c9h18rEqC+o2=c9h18qjEqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
2565.	c9h18rFqC+o2=c9h18qjFqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
2566.	c9h18rGqC+o2=c9h18qjGqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
2567.	c9h18rIqC+o2=c9h18qjIqC	4.82E+36	-8.2	5167.0
2568.	c9h18rHqC+o2=c9h18qjHqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
2569.	c9h18rCqC+o2=c9h18qjCqC	1.84E+45	-11.1	6538.0
2570.	c9h18rCqD+o2=c9h18qjCqD	1.84E+45	-11.1	6538.0
2571.	c9h18rBqD+o2=c9h18qjBqD	1.84E+45	-11.1	6538.0
2572.	c9h18rAqD+o2=c9h18qjAqD	4.82E+36	-8.2	5167.0
2573.	c9h18rEqD+o2=c9h18qjEqD	1.84E+45	-11.1	6538.0
2574.	c9h18rFqD+o2=c9h18qjFqD	1.84E+45	-11.1	6538.0
2575.	c9h18rGqD+o2=c9h18qjGqD	1.84E+45	-11.1	6538.0
2576.	c9h18rHqD+o2=c9h18qjHqD	1.84E+45	-11.1	6538.0
2577.	c9h18rIqD+o2=c9h18qjIqD	4.82E+36	-8.2	5167.0
2578.	c9h18rDqD+o2=c9h18qjDqD	1.84E+45	-11.1	6538.0
2579.	c9h18rDqE+o2=c9h18qjDqE	1.84E+45	-11.1	6538.0
2580.	c9h18rCqE+o2=c9h18qjCqE	1.84E+45	-11.1	6538.0
2581.	c9h18rBqE+o2=c9h18qjBqE	1.84E+45	-11.1	6538.0
2582.	c9h18rAqE+o2=c9h18qjAqE	4.82E+36	-8.2	5167.0
2583.	c9h18rEqE+o2=c9h18qjEqE	1.84E+45	-11.1	6538.0
2584.	c9h18rAqC=>oh+c2h4+c6h13hco	5.00E+13	0.0	25500.0
2585.	c9h18rCqA=>oh+ch2o+c8h16	5.00E+13	0.0	25500.0
2586.	c9h18rBqD=>oh+c3h6+c5h11hco	5.00E+13	0.0	25500.0
2587.	c9h18rDqB=>oh+ch3hco+c7h14	5.00E+13	0.0	25500.0
2588.	c9h18rCqE=>oh+c4h8+nc4h9hco	5.00E+13	0.0	25500.0
2589.	c9h18rEqC=>oh+ethco+c6h12	5.00E+13	0.0	25500.0
2590.	c9h18rAqA=oh+c8h17hco	1.00E+09	0.0	7500.0
2591.	c9h18rBqB=oh+nonanone	1.00E+09	0.0	7500.0
2592.	c9h18rCqC=oh+nonanone	1.00E+09	0.0	7500.0
2593.	c9h18rDqD=oh+nonanone	1.00E+09	0.0	7500.0
2594.	c9h18rEqE=oh+nonanone	2.00E+09	0.0	7500.0
2595.	c9h18rBqA=oh+c9h18o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
2596.	c9h18rCqA=oh+c9h18o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
2597.	c9h18rDqA=oh+c9h18o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
2598.	c9h18rEqA=oh+c9h18o#6	1.70E+08	0.0	1950.0
2599.	c9h18rAqB=oh+c9h18o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
2600.	c9h18rCqB=oh+c9h18o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
2601.	c9h18rDqB=oh+c9h18o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
2602.	c9h18rEqB=oh+c9h18o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
2603.	c9h18rFqB=oh+c9h18o#6	1.70E+08	0.0	1950.0
2604.	c9h18rBqC=oh+c9h18o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
2605.	c9h18rAqC=oh+c9h18o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
2606.	c9h18rDqC=oh+c9h18o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
2607.	c9h18rEqC=oh+c9h18o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
2608.	c9h18rFqC=oh+c9h18o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
2609.	c9h18rGqC=oh+c9h18o#6	1.70E+08	0.0	1950.0
2610.	c9h18rCqD=oh+c9h18o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
2611.	c9h18rBqD=oh+c9h18o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
2612.	c9h18rAqD=oh+c9h18o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
2613.	c9h18rEqD=oh+c9h18o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
2614.	c9h18rFqD=oh+c9h18o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
2615.	c9h18rGqD=oh+c9h18o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
2616.	c9h18rHqD=oh+c9h18o#6	1.70E+08	0.0	1950.0
2617.	c9h18rDqE=oh+c9h18o#3	6.10E+11	0.0	17950.0
2618.	c9h18rCqE=oh+c9h18o#4	9.20E+10	0.0	16600.0
2619.	c9h18rBqE=oh+c9h18o#5	2.10E+08	0.0	6500.0
2620.	c9h18rAqE=oh+c9h18o#6	1.70E+08	0.0	1950.0
2621.	c9h18rBqA=ho2+c9h18	8.50E+12	0.0	26000.0
2622.	c9h18rCqD=ho2+c9h18	8.50E+12	0.0	26000.0
2623.	c9h18rEqD=ho2+c9h18	8.50E+12	0.0	26000.0
2624.	c9h18rDqE=ho2+c9h18	8.50E+12	0.0	26000.0
2625.	c9h18rBqC=ho2+c9h18	8.50E+12	0.0	26000.0
2626.	c9h18rDqC=ho2+c9h18	8.50E+12	0.0	26000.0
2627.	c9h18rAqB=ho2+c9h18	8.50E+12	0.0	26000.0
2628.	c9h18rCqB=ho2+c9h18	8.50E+12	0.0	26000.0
2629.	c9h18qjBqA=>oh+c9h17oq	3.30E+09	1.0	30500.0
2630.	c9h18qjCqA=>oh+c9h17oq	5.70E+08	1.0	23000.0
2631.	c9h18qjDqA=>oh+c9h17oq	9.90E+07	1.0	20000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

2632.	c9h18qjEqA=>oh+c9h17oq	1.70E+07	1.0	19000.0
2633.	c9h18qjFqA=>oh+c9h17oq	1.70E+07	1.0	21000.0
2634.	c9h18qjGqA=>oh+c9h17oq	1.70E+07	1.0	21000.0
2635.	c9h18qjHqA=>oh+c9h17oq	1.70E+07	1.0	21000.0
2636.	c9h18qjIqA=>oh+c9h17oq	1.70E+07	1.0	21000.0
2637.	c9h18qjAqA=>oh+c9h17oq	3.30E+09	1.0	32500.0
2638.	c9h18qjCqD=>oh+c9h17oq	1.70E+09	1.0	27500.0
2639.	c9h18qjBqD=>oh+c9h17oq	2.90E+08	1.0	20000.0
2640.	c9h18qjAqD=>oh+c9h17oq	4.90E+07	1.0	17000.0
2641.	c9h18qjEqD=>oh+c9h17oq	1.70E+09	1.0	27500.0
2642.	c9h18qjFqD=>oh+c9h17oq	2.90E+08	1.0	20000.0
2643.	c9h18qjGqD=>oh+c9h17oq	4.90E+07	1.0	17000.0
2644.	c9h18qjHqD=>oh+c9h17oq	8.50E+06	1.0	16000.0
2645.	c9h18qjDqE=>oh+c9h17oq	1.70E+09	1.0	27500.0
2646.	c9h18qjCqE=>oh+c9h17oq	2.90E+08	1.0	20000.0
2647.	c9h18qjBqE=>oh+c9h17oq	4.90E+07	1.0	17000.0
2648.	c9h18qjAqE=>oh+c9h17oq	8.50E+06	1.0	16000.0
2649.	c9h18qjBqC=>oh+c9h17oq	1.70E+09	1.0	27500.0
2650.	c9h18qjAqC=>oh+c9h17oq	2.90E+08	1.0	20000.0
2651.	c9h18qjDqC=>oh+c9h17oq	1.70E+09	1.0	27500.0
2652.	c9h18qjEqC=>oh+c9h17oq	2.90E+08	1.0	20000.0
2653.	c9h18qjFqC=>oh+c9h17oq	4.90E+07	1.0	17000.0
2654.	c9h18qjGqC=>oh+c9h17oq	8.50E+06	1.0	16000.0
2655.	c9h18qjHqC=>oh+c9h17oq	1.70E+07	1.0	21000.0
2656.	c9h18qjIqC=>oh+c9h17oq	1.70E+07	1.0	21000.0
2657.	c9h18qjIqD=>oh+c9h17oq	1.70E+07	1.0	21000.0
2658.	c9h18qjAqB=>oh+c9h17oq	1.70E+09	1.0	27500.0
2659.	c9h18qjCqB=>oh+c9h17oq	1.70E+09	1.0	27500.0
2660.	c9h18qjDqB=>oh+c9h17oq	2.90E+08	1.0	20000.0
2661.	c9h18qjEqB=>oh+c9h17oq	4.90E+07	1.0	17000.0
2662.	c9h18qjFqB=>oh+c9h17oq	8.50E+06	1.0	16000.0
2663.	c9h18qjGqB=>oh+c9h17oq	1.70E+07	1.0	21000.0
2664.	c9h18qjHqB=>oh+c9h17oq	1.70E+07	1.0	21000.0
2665.	c9h18qjIqB=>oh+c9h17oq	1.70E+07	1.0	21000.0
2666.	c9h19o2h=>oh+ch2o+3c2h4+c2h5	1.50E+16	0.0	42000.0
2667.	c9h17o2h=>oh+ch2o+3c2h4+c2h3	1.50E+16	0.0	42000.0
2668.	c9h17oq=>oh+ch2hco+c6h13hco	1.00E+16	0.0	43000.0
2669.	c9h17oq=>oh+hcoch2hco+Ac6h13	1.00E+16	0.0	43000.0
2670.	c9h17oq=>oh+choch2ch2cho+Ac5h11	1.00E+16	0.0	43000.0
2671.	c9h17oq=>oh+ch2ch2hco+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
2672.	c9h17oq=>oh+ethco+ch2co+pc4h9	1.00E+16	0.0	43000.0
2673.	c9h17oq=>oh+ch3hco+c2h4+nc4h9co	1.00E+16	0.0	43000.0
2674.	c9h18o#3+H=>H2+ch2co+ch3+3c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
2675.	c9h18o#3+oh=>h2o+ch2co+ch3+3c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
2676.	c9h18o#3+ho2=>h2o2+ch2co+ch3+3c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
2677.	c9h18o#3+ch3=>ch4+ch2co+ch3+3c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
2678.	c9h18o#3+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3+3c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
2679.	c9h18o#3+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3+3c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
2680.	c9h18o#3+O=>oh+hco+4c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
2681.	c9h18o#4+H=>H2+hco+4c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
2682.	c9h18o#4+oh=>h2o+hco+4c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
2683.	c9h18o#4+ho2=>h2o2+hco+4c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
2684.	c9h18o#4+ch3=>ch4+hco+4c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
2685.	c9h18o#4+ch3o2=>ch3o2h+hco+4c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
2686.	c9h18o#4+c2h5=>c2h6+hco+4c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
2687.	c9h18o#4+O=>oh+hco+4c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
2688.	c9h18o#5+H=>H2+hco+4c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
2689.	c9h18o#5+oh=>h2o+c7h14+ch2hco	7.80E+06	2.0	-765.0
2690.	c9h18o#5+oh=>h2o+ch2co+Ac5h11+c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
2691.	c9h18o#5+oh=>h2o+c6h12+ch2coch3	7.80E+06	2.0	-765.0
2692.	c9h18o#5+oh=>h2o+c3h6+pc4h9+ch2co	7.80E+06	2.0	-765.0
2693.	c9h18o#5+ho2=>h2o2+hco+4c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
2694.	c9h18o#5+ch3=>ch4+hco+4c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
2695.	c9h18o#5+ch3o2=>ch3o2h+hco+4c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
2696.	c9h18o#5+c2h5=>c2h6+hco+4c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
2697.	c9h18o#5+O=>oh+hco+4c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
2698.	c9h18o#6+H=>H2+hco+4c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
2699.	c9h18o#6+oh=>h2o+hco+4c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
2700.	c9h18o#6+ho2=>h2o2+hco+4c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
2701.	c9h18o#6+ch3=>ch4+hco+4c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
2702.	c9h18o#6+ch3o2=>ch3o2h+hco+4c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
2703.	c9h18o#6+c2h5=>c2h6+hco+4c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
2704.	c9h18o#6+O=>oh+hco+4c2h4	7.80E+13	0.0	5200.0
2705.	c9h18+ch3=Ac7h15+c3h6	9.60E+10	0.0	8000.0
2706.	c9h18+oh=ch3+c7h15hco	1.00E+12	0.0	0.0
2707.	c9h18+oh=ch2o+Ac8h17	1.00E+12	0.0	0.0
2708.	c9h18+O=>ch2co+ch3+H+3c2h4	3.40E+07	1.8	550.0
2709.	c9h18+ho2=oh+c9h18o#3	1.00E+12	0.0	14400.0
2710.	c9h18=Ac6h13+ac3h5	1.00E+16	0.0	71000.0
2711.	c9h18+o2=ho2+Cc9h17-1	4.00E+12	0.0	40000.0
2712.	c9h18+ho2=h2o2+Cc9h17-1	1.00E+11	0.0	17060.0
2713.	c9h18+O=oh+Cc9h17-1	4.00E+13	0.0	4000.0
2714.	c9h18+H=H2+Cc9h17-1	6.55E+12	0.0	4445.0
2715.	c9h18+oh=h2o+Cc9h17-1	4.19E+06	2.0	-543.0
2716.	c9h18+ch3=ch4+Cc9h17-1	2.00E+11	0.0	6800.0
2717.	c9h18+c2h3=c2h4+Cc9h17-1	2.00E+11	0.0	6800.0
2718.	c9h18+nc3h7=c3h8+Cc9h17-1	2.00E+11	0.0	8300.0
2719.	Cc9h17-1=c4h6+Ac5h11	2.50E+13	0.0	35000.0
2720.	Cc9h17-1+H=c9h18	1.00E+13	0.0	0.0
2721.	Cc9h17-1+ho2=oh+acrol+Ac6h13	1.00E+12	0.0	8000.0
2722.	Dc4h7-1+Ec5h9-1=c9h16	1.00E+13	0.0	0.0
2723.	c8h17hco+H=H2+c8h17co	4.00E+13	0.0	4200.0
2724.	c8h17hco+oh=h2o+c8h17co	4.20E+12	0.0	500.0
2725.	c8h17hco+ho2=h2o2+c8h17co	1.00E+12	0.0	10000.0
2726.	c8h17hco+ch3=ch4+c8h17co	2.00E-06	5.6	2500.0
2727.	c8h17hco+c2h5=c2h6+c8h17co	1.30E+12	0.0	8500.0
2728.	c8h17co=>co+Ac8h17	2.00E+13	0.0	28700.0
2729.	c8h17co+ho2=>co2+oh+Ac8h17	2.00E+13	0.0	0.0
2730.	nonanone+H=>H2+ch2co+ch3+3c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
2731.	nonanone+oh=>h2o+ch2co+ch3+3c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
2732.	nonanone+ho2=>h2o2+ch2co+ch3+3c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
2733.	nonanone+ch3=>ch4+ch2co+ch3+3c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
2734.	nonanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3+3c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
2735.	nonanone+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3+3c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

2736.	c8h15hco=Hc8h15-1+hco	7.25E+16	0.0	82400.0
2737.	c8h15hco+o2=c8h15co+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0
2738.	c8h15hco+ho2=c8h15co+h2o2	1.70E+12	0.0	10700.0
2739.	c8h15hco+oh=c8h15co+h2o	2.35E+10	0.7	-1113.0
2740.	c8h15hco+O=c8h15co+oh	5.85E+12	0.0	1808.0
2741.	c8h15hco+H=c8h15co+H2	5.54E+02	3.5	5167.0
2742.	c8h15hco+ch3=c8h15co+ch4	2.25E+00	4.0	8285.0
2743.	c8h15hco+c2h5=c8h15co+c2h6	1.64E+00	3.6	9141.0
2744.	c8h15hco+hco=c8h15co+ch2o	4.70E+04	2.7	18235.0
2745.	c8h15hco+c2h3=c8h15co+c2h4	8.50E+09	0.0	6000.0
2746.	c8h15co=Hc8h15-1+co	2.00E+13	0.0	28700.0
2747.	c8h15co+ho2=>co2+oh+Hc8h15-1	2.00E+13	0.0	0.0
2748.	nc10h22=Ac5h11+Ac5h11	2.00E+17	0.0	83180.0
2749.	nc10h22=pc4h9+Ac6h13	2.00E+17	0.0	83180.0
2750.	nc10h22=nc3h7+Ac7h15	2.00E+17	0.0	83400.0
2751.	nc10h22=c2h5+Ac8h17	2.00E+17	0.0	83680.0
2752.	nc10h22=ch3+Ac9h19	2.00E+17	0.0	85570.0
2753.	nc10h22=H+Ac10h21	1.00E+15	0.0	100000.0
2754.	nc10h22=H+Bc10h21	1.00E+15	0.0	100000.0
2755.	nc10h22=H+Cc10h21	1.00E+15	0.0	100000.0
2756.	nc10h22=H+Dc10h21	1.00E+15	0.0	100000.0
2757.	nc10h22=H+Ec10h21	1.00E+15	0.0	100000.0
2758.	nc10h22+o2=ho2+Ac10h21	4.20E+13	0.0	51800.0
2759.	nc10h22+o2=ho2+Bc10h21	1.40E+13	0.0	48000.0
2760.	nc10h22+o2=ho2+Cc10h21	1.40E+13	0.0	48000.0
2761.	nc10h22+o2=ho2+Dc10h21	1.40E+13	0.0	48000.0
2762.	nc10h22+o2=ho2+Ec10h21	1.40E+13	0.0	48000.0
2763.	nc10h22+oh=h2o+Ac10h21	1.41E+07	1.8	973.7
2764.	nc10h22+oh=h2o+Bc10h21	1.99E+06	2.0	-596.2
2765.	nc10h22+oh=h2o+Cc10h21	2.25E+06	2.0	-1391.0
2766.	nc10h22+oh=h2o+Dc10h21	2.25E+06	2.0	-1391.0
2767.	nc10h22+oh=h2o+Ec10h21	2.25E+06	2.0	-1391.0
2768.	nc10h22+ho2=h2o2+Ac10h21	1.12E+13	0.0	19400.0
2769.	nc10h22+ho2=h2o2+Bc10h21	4.00E+13	0.0	17021.0
2770.	nc10h22+ho2=h2o2+Cc10h21	4.00E+13	0.0	17021.0
2771.	nc10h22+ho2=h2o2+Dc10h21	4.00E+13	0.0	17021.0
2772.	nc10h22+ho2=h2o2+Ec10h21	4.00E+13	0.0	17021.0
2773.	nc10h22+H=H2+Ac10h21	5.70E+07	2.0	7700.0
2774.	nc10h22+H=H2+Bc10h21	1.80E+07	2.0	5000.0
2775.	nc10h22+H=H2+Cc10h21	1.80E+07	2.0	5000.0
2776.	nc10h22+H=H2+Dc10h21	1.80E+07	2.0	5000.0
2777.	nc10h22+H=H2+Ec10h21	1.80E+07	2.0	5000.0
2778.	O+nc10h22=oh+Ac10h21	1.00E+14	0.0	7850.0
2779.	O+nc10h22=oh+Bc10h21	5.20E+13	0.0	5200.0
2780.	O+nc10h22=oh+Cc10h21	5.20E+13	0.0	5200.0
2781.	O+nc10h22=oh+Dc10h21	5.20E+13	0.0	5200.0
2782.	O+nc10h22=oh+Ec10h21	5.20E+13	0.0	5200.0
2783.	nc10h22+ch3=ch4+Ac10h21	6.00E-01	4.0	8200.0
2784.	nc10h22+ch3=ch4+Bc10h21	4.00E+11	0.0	9600.0
2785.	nc10h22+ch3=ch4+Cc10h21	4.00E+11	0.0	9600.0
2786.	nc10h22+ch3=ch4+Dc10h21	4.00E+11	0.0	9600.0
2787.	nc10h22+ch3=ch4+Ec10h21	4.00E+11	0.0	9600.0
2788.	nc10h22+c2h5=c2h6+Ac10h21	6.00E+11	0.0	13500.0
2789.	nc10h22+c2h5=c2h6+Bc10h21	4.00E+11	0.0	11000.0
2790.	nc10h22+c2h5=c2h6+Cc10h21	4.00E+11	0.0	11000.0
2791.	nc10h22+c2h5=c2h6+Dc10h21	4.00E+11	0.0	11000.0
2792.	nc10h22+c2h5=c2h6+Ec10h21	4.00E+11	0.0	11000.0
2793.	nc10h22+hco=ch2o+Ac10h21	2.00E+05	2.5	18500.0
2794.	nc10h22+hco=ch2o+Bc10h21	2.20E+07	1.9	17000.0
2795.	nc10h22+hco=ch2o+Cc10h21	2.20E+07	1.9	17000.0
2796.	nc10h22+hco=ch2o+Dc10h21	2.20E+07	1.9	17000.0
2797.	nc10h22+hco=ch2o+Ec10h21	2.20E+07	1.9	17000.0
2798.	nc10h22+ch3o=ch3oh+Ac10h21	3.20E+11	0.0	7300.0
2799.	nc10h22+ch3o=ch3oh+Bc10h21	2.90E+11	0.0	4500.0
2800.	nc10h22+ch3o=ch3oh+Cc10h21	2.90E+11	0.0	4500.0
2801.	nc10h22+ch3o=ch3oh+Dc10h21	2.90E+11	0.0	4500.0
2802.	nc10h22+ch3o=ch3oh+Ec10h21	2.90E+11	0.0	4500.0
2803.	nc10h22+ch2oh=ch3oh+Ac10h21	2.00E+02	3.0	14000.0
2804.	nc10h22+ch2oh=ch3oh+Bc10h21	1.20E+02	3.0	12000.0
2805.	nc10h22+ch2oh=ch3oh+Cc10h21	1.20E+02	3.0	12000.0
2806.	nc10h22+ch2oh=ch3oh+Dc10h21	1.20E+02	3.0	12000.0
2807.	nc10h22+ch2oh=ch3oh+Ec10h21	1.20E+02	3.0	12000.0
2808.	nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Ac10h21	1.20E+13	0.0	20000.0
2809.	nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Bc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2810.	nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Cc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2811.	nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Dc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2812.	nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Ec10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2813.	nc10h22+ch2hco=ch3hco+Ac10h21	6.00E+11	0.0	13700.0
2814.	nc10h22+ch2hco=ch3hco+Bc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2815.	nc10h22+ch2hco=ch3hco+Cc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2816.	nc10h22+ch2hco=ch3hco+Dc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2817.	nc10h22+ch2hco=ch3hco+Ec10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2818.	nc10h22+ch3co=ch3hco+Ac10h21	3.00E+11	0.0	15000.0
2819.	nc10h22+ch3co=ch3hco+Bc10h21	2.00E+11	0.0	12700.0
2820.	nc10h22+ch3co=ch3hco+Cc10h21	2.00E+11	0.0	12700.0
2821.	nc10h22+ch3co=ch3hco+Dc10h21	2.00E+11	0.0	12700.0
2822.	nc10h22+ch3co=ch3hco+Ec10h21	2.00E+11	0.0	12700.0
2823.	nc10h22+nc3h7=c3h8+Ac10h21	6.00E+11	0.0	13700.0
2824.	nc10h22+nc3h7=c3h8+Bc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2825.	nc10h22+nc3h7=c3h8+Cc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2826.	nc10h22+nc3h7=c3h8+Dc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2827.	nc10h22+nc3h7=c3h8+Ec10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2828.	nc10h22+pc4h9=c4h10+Ac10h21	6.00E+11	0.0	13700.0
2829.	nc10h22+pc4h9=c4h10+Bc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2830.	nc10h22+pc4h9=c4h10+Cc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2831.	nc10h22+pc4h9=c4h10+Dc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2832.	nc10h22+pc4h9=c4h10+Ec10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2833.	nc10h22+Ac5h11=c5h12+Ac10h21	6.00E+11	0.0	13700.0
2834.	nc10h22+Ac5h11=c5h12+Bc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2835.	nc10h22+Ac5h11=c5h12+Cc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2836.	nc10h22+Ac5h11=c5h12+Dc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2837.	nc10h22+Ac5h11=c5h12+Ec10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2838.	nc10h22+Ac6h13=c6h14+Ac10h21	6.00E+11	0.0	13700.0
2839.	nc10h22+Ac6h13=c6h14+Bc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

2840.	nc10h22+Ac6h13=c6h14+Cc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2841.	nc10h22+Ac6h13=c6h14+Dc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2842.	nc10h22+Ac6h13=c6h14+Ec10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2843.	nc10h22+Ac7h15=c7h16+Ac10h21	6.00E+11	0.0	13700.0
2844.	nc10h22+Ac7h15=c7h16+Bc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2845.	nc10h22+Ac7h15=c7h16+Cc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2846.	nc10h22+Ac7h15=c7h16+Dc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2847.	nc10h22+Ac7h15=c7h16+Ec10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2848.	nc10h22+Ac8h17=c8h18+Ac10h21	6.00E+11	0.0	13700.0
2849.	nc10h22+Ac8h17=c8h18+Bc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2850.	nc10h22+Ac8h17=c8h18+Cc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2851.	nc10h22+Ac8h17=c8h18+Dc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2852.	nc10h22+Ac8h17=c8h18+Ec10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2853.	nc10h22+Ac9h19=c9h20+Ac10h21	6.00E+11	0.0	13700.0
2854.	nc10h22+Ac9h19=c9h20+Bc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2855.	nc10h22+Ac9h19=c9h20+Cc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2856.	nc10h22+Ac9h19=c9h20+Dc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2857.	nc10h22+Ac9h19=c9h20+Ec10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2858.	nc10h22+Bc9h19=c9h20+Ac10h21	6.00E+11	0.0	14700.0
2859.	nc10h22+Bc9h19=c9h20+Bc10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2860.	nc10h22+Bc9h19=c9h20+Cc10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2861.	nc10h22+Bc9h19=c9h20+Dc10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2862.	nc10h22+Bc9h19=c9h20+Ec10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2863.	nc10h22+Cc9h19=c9h20+Ac10h21	6.00E+11	0.0	14700.0
2864.	nc10h22+Cc9h19=c9h20+Bc10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2865.	nc10h22+Cc9h19=c9h20+Cc10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2866.	nc10h22+Cc9h19=c9h20+Dc10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2867.	nc10h22+Cc9h19=c9h20+Ec10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2868.	nc10h22+Dc9h19=c9h20+Ac10h21	6.00E+11	0.0	14700.0
2869.	nc10h22+Dc9h19=c9h20+Bc10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2870.	nc10h22+Dc9h19=c9h20+Cc10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2871.	nc10h22+Dc9h19=c9h20+Dc10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2872.	nc10h22+Dc9h19=c9h20+Ec10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2873.	nc10h22+Ec9h19=c9h20+Ac10h21	6.00E+11	0.0	14700.0
2874.	nc10h22+Ec9h19=c9h20+Bc10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2875.	nc10h22+Ec9h19=c9h20+Cc10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2876.	nc10h22+Ec9h19=c9h20+Dc10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2877.	nc10h22+Ec9h19=c9h20+Ec10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2878.	nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Bc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2879.	nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Cc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2880.	nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Dc10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2881.	nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Ec10h21	4.00E+11	0.0	11400.0
2882.	nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Cc10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2883.	nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Dc10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2884.	nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Ec10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
2885.	nc10h22+Cc10h21=nc10h22+Dc10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	12400.0
2886.	nc10h22+Cc10h21=nc10h22+Ec10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	12400.0
2887.	nc10h22+Dc10h21=nc10h22+Ec10h21	4.00E+11	0.0	12400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	12400.0
2888.	nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Ac10h21	1.20E+13	0.0	20000.0
2889.	nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Bc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2890.	nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Cc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2891.	nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Dc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2892.	nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Ec10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2893.	nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Ac10h21	1.20E+13	0.0	20000.0
2894.	nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Bc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2895.	nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Cc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2896.	nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Dc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2897.	nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Ec10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2898.	nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Ac10h21	1.20E+13	0.0	20000.0
2899.	nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Bc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2900.	nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Cc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2901.	nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Dc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2902.	nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Ec10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2903.	nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Ac10h21	1.20E+13	0.0	20000.0
2904.	nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Bc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2905.	nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Cc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2906.	nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Dc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2907.	nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Ec10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2908.	nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Ac10h21	1.20E+13	0.0	20000.0
2909.	nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Bc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2910.	nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Cc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2911.	nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Dc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2912.	nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Ec10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
2913.	Ac10h21=Ac8h17+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
2914.	Bc10h21=Ac7h15+c3h6	2.00E+13	0.0	28700.0
2915.	Cc10h21=Ac6h13+c4h8	2.00E+13	0.0	28700.0
2916.	Cc10h21=ch3+c9h18	2.00E+13	0.0	31000.0
2917.	Dc10h21=Ac5h11+c5h10	2.00E+13	0.0	28700.0
2918.	Dc10h21=c2h5+c8h16	2.00E+13	0.0	28700.0
2919.	Ec10h21=pc4h9+c6h12	2.00E+13	0.0	28700.0
2920.	Ec10h21=nc3h7+c7h14	2.00E+13	0.0	28700.0
2921.	Ac10h21=H+c10h20-1	3.00E+13	0.0	38000.0
2922.	Bc10h21=H+c10h20-1	3.00E+13	0.0	38000.0
2923.	Bc10h21=H+c10h20-2	3.00E+13	0.0	39000.0
2924.	Cc10h21=H+c10h20-2	3.00E+13	0.0	38000.0
2925.	Cc10h21=H+c10h20-3	3.00E+13	0.0	38000.0
2926.	Dc10h21=H+c10h20-3	3.00E+13	0.0	38000.0
2927.	Dc10h21=H+c10h20-4	3.00E+13	0.0	38000.0
2928.	Ec10h21=H+c10h20-4	3.00E+13	0.0	38000.0
2929.	Ec10h21=H+c10h20-5	3.00E+13	0.0	38000.0
2930.	Ac10h21+o2=c10h20-1+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2931.	Bc10h21+o2=c10h20-1+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2932.	Bc10h21+o2=c10h20-2+ho2	8.10E+11	0.0	5000.0
2933.	Cc10h21+o2=c10h20-2+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2934.	Cc10h21+o2=c10h20-3+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2935.	Dc10h21+o2=c10h20-3+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2936.	Dc10h21+o2=c10h20-4+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2937.	Ec10h21+o2=c10h20-4+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2938.	Ec10h21+o2=c10h20-5+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2939.	Ac10h21+O=ch2o+Ac9h19	2.00E+13	0.0	4000.0
2940.	Bc10h21+O=ch3hco+Ac8h17	2.00E+13	0.0	4000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

2941.	Bc10h21+O=ch3+c8h17hco	2.00E+13	0.0	4000.0
2942.	Cc10h21+O=ethco+Ac7h15	2.00E+13	0.0	4000.0
2943.	Cc10h21+O=c2h5+c7h15hco	2.00E+13	0.0	4000.0
2944.	Dc10h21+O=nc3h7+c6h13hco	2.00E+13	0.0	4000.0
2945.	Dc10h21+O=nc3h7hco+Ac6h13	2.00E+13	0.0	4000.0
2946.	Ec10h21+O=pc4h9+c5h11hco	2.00E+13	0.0	4000.0
2947.	Ec10h21+O=nc4h9hco+Ac5h11	2.00E+13	0.0	4000.0
2948.	Ac10h21+oh=ch2o+c9h20	2.00E+13	0.0	4000.0
2949.	Bc10h21+oh=ch3hco+c8h18	2.00E+13	0.0	4000.0
2950.	Bc10h21+oh=ch4+c8h17hco	2.00E+13	0.0	4000.0
2951.	Cc10h21+oh=ethco+c7h16	2.00E+13	0.0	4000.0
2952.	Cc10h21+oh=c2h6+c7h15hco	2.00E+13	0.0	4000.0
2953.	Dc10h21+oh=c3h8+c6h13hco	2.00E+13	0.0	4000.0
2954.	Dc10h21+oh=nc3h7hco+c6h14	2.00E+13	0.0	4000.0
2955.	Ec10h21+oh=c4h10+c5h11hco	2.00E+13	0.0	4000.0
2956.	Ec10h21+oh=nc4h9hco+c5h12	2.00E+13	0.0	4000.0
2957.	Ac10h21+ho2=ch2o+Ac9h19+oh	5.00E+12	0.0	0.0
2958.	Bc10h21+ho2=ch3hco+Ac8h17+oh	5.00E+12	0.0	0.0
2959.	Bc10h21+ho2=ch3+c8h17hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
2960.	Cc10h21+ho2=ethco+Ac7h15+oh	5.00E+12	0.0	0.0
2961.	Cc10h21+ho2=c2h5+c7h15hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
2962.	Dc10h21+ho2=nc3h7+c6h13hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
2963.	Dc10h21+ho2=nc3h7hco+Ac6h13+oh	5.00E+12	0.0	0.0
2964.	Ec10h21+ho2=pc4h9+c5h11hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
2965.	Ec10h21+ho2=nc4h9hco+Ac5h11+oh	5.00E+12	0.0	0.0
2966.	Ac10h21=Dc10h21	5.70E+08	1.0	17300.0
2967.	Ac10h21=Ec10h21	9.90E+07	1.0	12000.0
2968.	Bc10h21=Ec10h21	5.70E+08	1.0	17300.0
2969.	Bc10h21=Dc10h21	1.70E+07	1.0	17400.0
2970.	Bc10h21=Cc10h21	2.90E+06	1.0	20900.0
2971.	Cc10h21=Ec10h21	5.70E+08	1.0	17300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.70E+08	1.0	17300.0
2972.	Cc10h21=Dc10h21	9.90E+07	1.0	12000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	9.90E+07	1.0	12000.0
2973.	Ac10h21+o2=c10h21qjA	9.00E+18	-2.5	0.0
2974.	Bc10h21+o2=c10h21qjB	1.70E+19	-2.5	0.0
2975.	Cc10h21+o2=c10h21qjC	1.80E+19	-2.5	0.0
2976.	Dc10h21+o2=c10h21qjD	1.80E+19	-2.5	0.0
2977.	Ec10h21+o2=c10h21qjE	1.80E+19	-2.5	0.0
2978.	Ac10h21+ho2=c10h21ojA+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
2979.	Bc10h21+ho2=c10h21ojB+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
2980.	Cc10h21+ho2=c10h21ojC+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
2981.	Dc10h21+ho2=c10h21ojD+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
2982.	Ec10h21+ho2=c10h21ojE+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
2983.	Ac10h21+ch3o2=c10h21ojA+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
2984.	Bc10h21+ch3o2=c10h21ojB+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
2985.	Cc10h21+ch3o2=c10h21ojC+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
2986.	Dc10h21+ch3o2=c10h21ojD+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
2987.	Ec10h21+ch3o2=c10h21ojE+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
2988.	Ac10h21+c2h5o2=c10h21ojA+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
2989.	Bc10h21+c2h5o2=c10h21ojB+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
2990.	Cc10h21+c2h5o2=c10h21ojC+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
2991.	Dc10h21+c2h5o2=c10h21ojD+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
2992.	Ec10h21+c2h5o2=c10h21ojE+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
2993.	Ac10h21+nc3h7o2=c10h21ojA+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
2994.	Bc10h21+nc3h7o2=c10h21ojB+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
2995.	Cc10h21+nc3h7o2=c10h21ojC+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
2996.	Dc10h21+nc3h7o2=c10h21ojD+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
2997.	Ec10h21+nc3h7o2=c10h21ojE+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
2998.	Ac10h21+ic3h7o2=c10h21ojA+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
2999.	Bc10h21+ic3h7o2=c10h21ojB+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3000.	Cc10h21+ic3h7o2=c10h21ojC+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3001.	Dc10h21+ic3h7o2=c10h21ojD+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3002.	Ec10h21+ic3h7o2=c10h21ojE+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3003.	Ac10h21+c10h21qjA=2c10h21ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
3004.	Bc10h21+c10h21qjA=c10h21ojB+c10h21ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
3005.	Cc10h21+c10h21qjA=c10h21ojC+c10h21ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
3006.	Dc10h21+c10h21qjA=c10h21ojD+c10h21ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
3007.	Ec10h21+c10h21qjA=c10h21ojE+c10h21ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
3008.	Ac10h21+c10h21qjB=c10h21ojA+c10h21ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
3009.	Bc10h21+c10h21qjB=2c10h21ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
3010.	Cc10h21+c10h21qjB=c10h21ojC+c10h21ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
3011.	Dc10h21+c10h21qjB=c10h21ojD+c10h21ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
3012.	Ec10h21+c10h21qjB=c10h21ojE+c10h21ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
3013.	Ac10h21+c10h21qjC=c10h21ojA+c10h21ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
3014.	Bc10h21+c10h21qjC=c10h21ojB+c10h21ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
3015.	Cc10h21+c10h21qjC=2c10h21ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
3016.	Dc10h21+c10h21qjC=c10h21ojD+c10h21ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
3017.	Ec10h21+c10h21qjC=c10h21ojE+c10h21ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
3018.	Ac10h21+c10h21qjD=c10h21ojA+c10h21ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
3019.	Bc10h21+c10h21qjD=c10h21ojB+c10h21ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
3020.	Cc10h21+c10h21qjD=c10h21ojC+c10h21ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
3021.	Dc10h21+c10h21qjD=2c10h21ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
3022.	Ec10h21+c10h21qjD=c10h21ojE+c10h21ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
3023.	Ac10h21+c10h21qjE=c10h21ojA+c10h21ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
3024.	Bc10h21+c10h21qjE=c10h21ojB+c10h21ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
3025.	Cc10h21+c10h21qjE=c10h21ojC+c10h21ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
3026.	Dc10h21+c10h21qjE=c10h21ojD+c10h21ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
3027.	Ec10h21+c10h21qjE=2c10h21ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
3028.	c10h21ojA=ch2o+Ac9h19	1.00E+15	0.0	21600.0
3029.	c10h21ojB=ch3hco+Ac8h17	7.94E+14	0.0	15300.0
3030.	c10h21ojB=ch3+c8h17hco	7.94E+14	0.0	15300.0
3031.	c10h21ojC=ethco+Ac7h15	7.94E+14	0.0	15300.0
3032.	c10h21ojC=c2h5+c7h15hco	7.94E+14	0.0	15300.0
3033.	c10h21ojD=nc3h7+c6h13hco	7.94E+14	0.0	15300.0
3034.	c10h21ojD=nc3h7hco+Ac6h13	7.94E+14	0.0	15300.0
3035.	c10h21ojE=pc4h9+c5h11hco	7.94E+14	0.0	15300.0
3036.	c10h21ojE=nc4h9hco+Ac5h11	7.94E+14	0.0	15300.0
3037.	c10h21qA=oh+c10h21ojA	1.50E+16	0.0	42500.0
3038.	c10h21qB=oh+c10h21ojB	1.25E+16	0.0	41600.0
3039.	c10h21qC=oh+c10h21ojC	1.25E+16	0.0	41600.0
3040.	c10h21qD=oh+c10h21ojD	1.25E+16	0.0	41600.0
3041.	c10h21qE=oh+c10h21ojE	1.25E+16	0.0	41600.0
3042.	c10h21qjA=c10h20rBqA	3.30E+09	1.0	34000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

3043.	c10h21qjA=c10h20rCqA	5.70E+08	1.0	26500.0
3044.	c10h21qjA=c10h20rDqA	9.90E+07	1.0	23500.0
3045.	c10h21qjA=c10h20rEqA	1.70E+07	1.0	22500.0
3046.	c10h21qjB=c10h20rAqB	5.00E+09	1.0	37000.0
3047.	c10h21qjB=c10h20rCqB	3.30E+09	1.0	34000.0
3048.	c10h21qjB=c10h20rDqB	5.70E+08	1.0	26500.0
3049.	c10h21qjB=c10h20rEqB	9.90E+07	1.0	23500.0
3050.	c10h21qjB=c10h20rFqB	1.70E+07	1.0	22500.0
3051.	c10h21qjC=c10h20rBqC	3.30E+09	1.0	34000.0
3052.	c10h21qjC=c10h20rAqC	8.60E+08	1.0	29500.0
3053.	c10h21qjC=c10h20rDqC	3.30E+09	1.0	34000.0
3054.	c10h21qjC=c10h20rEqC	5.70E+08	1.0	26500.0
3055.	c10h21qjC=c10h20rFqC	9.90E+07	1.0	23500.0
3056.	c10h21qjC=c10h20rGqC	1.70E+07	1.0	22500.0
3057.	c10h21qjD=c10h20rCqD	3.30E+09	1.0	34000.0
3058.	c10h21qjD=c10h20rBqD	5.70E+08	1.0	26500.0
3059.	c10h21qjD=c10h20rAqD	1.50E+08	1.0	26500.0
3060.	c10h21qjD=c10h20rEqD	3.30E+09	1.0	34000.0
3061.	c10h21qjD=c10h20rFqD	5.70E+08	1.0	26500.0
3062.	c10h21qjD=c10h20rGqD	9.90E+07	1.0	23500.0
3063.	c10h21qjD=c10h20rHqD	1.70E+07	1.0	22500.0
3064.	c10h21qjE=c10h20rDqE	3.30E+09	1.0	34000.0
3065.	c10h21qjE=c10h20rCqE	5.70E+08	1.0	26500.0
3066.	c10h21qjE=c10h20rBqE	9.90E+07	1.0	23500.0
3067.	c10h21qjE=c10h20rAqE	2.50E+07	1.0	25500.0
3068.	c10h21qjE=c10h20rFqE	3.30E+09	1.0	34000.0
3069.	c10h21qjE=c10h20rGqE	5.70E+08	1.0	26500.0
3070.	c10h21qjE=c10h20rHqE	9.90E+07	1.0	23500.0
3071.	c10h21qjE=c10h20rIqE	1.70E+07	1.0	22500.0
3072.	c10h21qjA+ho2=c10h21qA+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
3073.	c10h21qjB+ho2=c10h21qB+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
3074.	c10h21qjC+ho2=c10h21qC+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
3075.	c10h21qjD+ho2=c10h21qD+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
3076.	c10h21qjE+ho2=c10h21qE+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
3077.	c10h21qjA+h2o2=c10h21qA+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
3078.	c10h21qjB+h2o2=c10h21qB+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
3079.	c10h21qjC+h2o2=c10h21qC+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
3080.	c10h21qjD+h2o2=c10h21qD+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
3081.	c10h21qjE+h2o2=c10h21qE+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
3082.	c10h21qjA+ho2=>c10h21ojA+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
3083.	c10h21qjB+ho2=>c10h21ojB+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
3084.	c10h21qjC+ho2=>c10h21ojC+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
3085.	c10h21qjD+ho2=>c10h21ojD+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
3086.	c10h21qjE+ho2=>c10h21ojE+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
3087.	c10h20rBqA=c10h20rEqA	5.70E+08	1.0	17300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.70E+08	1.0	17300.0
3088.	c10h20rBqA=c10h20rFqA	9.90E+07	1.0	12000.0
3089.	c10h20rBqA=c10h20rGqA	1.70E+07	1.0	17400.0
3090.	c10h20rBqA=c10h20rHqA	2.90E+06	1.0	20900.0
3091.	c10h20rCqA=c10h20rFqA	5.70E+08	1.0	17300.0
3092.	c10h20rCqA=c10h20rGqA	9.90E+07	1.0	12000.0
3093.	c10h20rCqA=c10h20rHqA	1.70E+07	1.0	17400.0
3094.	c10h20rCqA=c10h20rIqA	2.90E+06	1.0	20900.0
3095.	c10h20rDqA=c10h20rAqA	5.70E+08	1.0	17800.0
3096.	c10h20rDqA=c10h20rGqA	5.70E+08	1.0	17300.0
3097.	c10h20rDqA=c10h20rHqA	9.90E+07	1.0	12000.0
3098.	c10h20rDqA=c10h20rIqA	1.70E+07	1.0	17400.0
3099.	c10h20rDqA=c10h20rJqA	4.40E+06	1.0	23400.0
3100.	c10h20rEqA=c10h20rAqA	9.90E+07	1.0	12500.0
3101.	c10h20rEqA=c10h20rHqA	5.70E+08	1.0	17300.0
3102.	c10h20rEqA=c10h20rIqA	9.90E+07	1.0	12000.0
3103.	c10h20rEqA=c10h20rJqA	2.50E+07	1.0	19900.0
3104.	c10h20rFqA=c10h20rIqA	5.70E+08	1.0	17300.0
3105.	c10h20rFqA=c10h20rJqA	1.50E+08	1.0	14500.0
3106.	c10h20rFqA=c10h20rAqA	1.70E+07	1.0	17900.0
3107.	c10h20rGqA=c10h20rJqA	8.60E+08	1.0	19800.0
3108.	c10h20rGqA=c10h20rAqA	2.90E+06	1.0	21400.0
3109.	c10h20rAqB=c10h20rDqB	5.70E+08	1.0	17300.0
3110.	c10h20rAqB=c10h20rEqB	9.90E+07	1.0	12000.0
3111.	c10h20rAqB=c10h20rFqB	1.70E+07	1.0	17400.0
3112.	c10h20rAqB=c10h20rGqB	2.90E+06	1.0	20900.0
3113.	c10h20rCqB=c10h20rFqB	5.70E+08	1.0	17300.0
3114.	c10h20rCqB=c10h20rGqB	9.90E+07	1.0	12000.0
3115.	c10h20rCqB=c10h20rHqB	1.70E+07	1.0	17400.0
3116.	c10h20rCqB=c10h20rIqB	2.90E+06	1.0	20900.0
3117.	c10h20rDqB=c10h20rGqB	5.70E+08	1.0	17300.0
3118.	c10h20rDqB=c10h20rHqB	9.90E+07	1.0	12000.0
3119.	c10h20rDqB=c10h20rIqB	1.70E+07	1.0	17400.0
3120.	c10h20rDqB=c10h20rJqB	4.40E+06	1.0	23400.0
3121.	c10h20rEqB=c10h20rBqB	2.90E+08	1.0	15300.0
3122.	c10h20rEqB=c10h20rHqB	5.70E+08	1.0	17300.0
3123.	c10h20rEqB=c10h20rIqB	9.90E+07	1.0	12000.0
3124.	c10h20rEqB=c10h20rJqB	2.50E+07	1.0	19900.0
3125.	c10h20rFqB=c10h20rIqB	5.70E+08	1.0	17300.0
3126.	c10h20rFqB=c10h20rJqB	1.50E+08	1.0	14500.0
3127.	c10h20rFqB=c10h20rBqB	4.90E+07	1.0	10000.0
3128.	c10h20rGqB=c10h20rJqB	8.60E+08	1.0	19800.0
3129.	c10h20rGqB=c10h20rBqB	8.50E+06	1.0	15400.0
3130.	c10h20rHqB=c10h20rBqB	1.50E+06	1.0	18900.0
3131.	c10h20rAqC=c10h20rDqC	5.70E+08	1.0	17300.0
3132.	c10h20rAqC=c10h20rEqC	9.90E+07	1.0	12000.0
3133.	c10h20rAqC=c10h20rFqC	1.70E+07	1.0	17400.0
3134.	c10h20rAqC=c10h20rGqC	2.90E+06	1.0	20900.0
3135.	c10h20rBqC=c10h20rEqC	5.70E+08	1.0	17300.0
3136.	c10h20rBqC=c10h20rFqC	9.90E+07	1.0	12000.0
3137.	c10h20rBqC=c10h20rGqC	1.70E+07	1.0	17400.0
3138.	c10h20rBqC=c10h20rHqC	2.90E+06	1.0	20900.0
3139.	c10h20rDqC=c10h20rGqC	5.70E+08	1.0	17300.0
3140.	c10h20rDqC=c10h20rHqC	9.90E+07	1.0	12000.0
3141.	c10h20rDqC=c10h20rIqC	1.70E+07	1.0	17400.0
3142.	c10h20rDqC=c10h20rJqC	4.40E+06	1.0	23400.0
3143.	c10h20rEqC=c10h20rHqC	5.70E+08	1.0	17300.0
3144.	c10h20rEqC=c10h20rIqC	9.90E+07	1.0	12000.0
3145.	c10h20rEqC=c10h20rJqC	2.50E+07	1.0	19900.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

3146.	c10h20rFqC=c10h20rIqC	5.70E+08	1.0	17300.0
3147.	c10h20rFqC=c10h20rJqC	1.50E+08	1.0	14500.0
3148.	c10h20rFqC=c10h20rCqC	2.90E+08	1.0	15300.0
3149.	c10h20rGqC=c10h20rJqC	8.60E+08	1.0	19800.0
3150.	c10h20rGqC=c10h20rCqC	4.90E+07	1.0	8000.0
3151.	c10h20rHqC=c10h20rCqC	8.50E+06	1.0	17400.0
3152.	c10h20rIqC=c10h20rCqC	1.50E+06	1.0	18900.0
3153.	c10h20rAqD=c10h20rDqD	2.90E+08	1.0	15300.0
3154.	c10h20rAqD=c10h20rEqD	9.90E+07	1.0	12000.0
3155.	c10h20rAqD=c10h20rFqD	1.70E+07	1.0	17400.0
3156.	c10h20rAqD=c10h20rGqD	2.90E+06	1.0	20900.0
3157.	c10h20rBqD=c10h20rEqD	5.70E+08	1.0	17300.0
3158.	c10h20rBqD=c10h20rFqD	9.90E+07	1.0	12000.0
3159.	c10h20rBqD=c10h20rGqD	1.70E+07	1.0	17400.0
3160.	c10h20rBqD=c10h20rHqD	2.90E+06	1.0	20900.0
3161.	c10h20rCqD=c10h20rFqD	5.70E+08	1.0	17300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.70E+08	1.0	17300.0
3162.	c10h20rCqD=c10h20rGqD	9.90E+07	1.0	12000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	9.90E+07	1.0	12000.0
3163.	c10h20rCqD=c10h20rHqD	1.70E+07	1.0	17400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.70E+07	1.0	17400.0
3164.	c10h20rCqD=c10h20rIqD	2.90E+06	1.0	20900.0
3165.	c10h20rDqD=c10h20rJqD	4.40E+06	1.0	29400.0
3166.	c10h20rEqD=c10h20rHqD	5.70E+08	1.0	17300.0
3167.	c10h20rEqD=c10h20rIqD	9.90E+07	1.0	12000.0
3168.	c10h20rEqD=c10h20rJqD	2.50E+07	1.0	19900.0
3169.	c10h20rFqD=c10h20rIqD	5.70E+08	1.0	17300.0
3170.	c10h20rFqD=c10h20rJqD	1.50E+08	1.0	14500.0
3171.	c10h20rGqD=c10h20rJqD	8.60E+08	1.0	19800.0
3172.	c10h20rGqD=c10h20rDqD	2.90E+08	1.0	15300.0
3173.	c10h20rHqD=c10h20rDqD	4.90E+07	1.0	10000.0
3174.	c10h20rIqD=c10h20rDqD	8.50E+06	1.0	15400.0
3175.	c10h20rAqE=c10h20rEqE	4.90E+07	1.0	10000.0
3176.	c10h20rAqE=c10h20rFqE	1.70E+07	1.0	17400.0
3177.	c10h20rAqE=c10h20rGqE	2.90E+06	1.0	20900.0
3178.	c10h20rBqE=c10h20rEqE	2.90E+08	1.0	15300.0
3179.	c10h20rBqE=c10h20rFqE	9.90E+07	1.0	12000.0
3180.	c10h20rBqE=c10h20rGqE	1.70E+07	1.0	17400.0
3181.	c10h20rBqE=c10h20rHqE	2.90E+06	1.0	20900.0
3182.	c10h20rCqE=c10h20rFqE	5.70E+08	1.0	17300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.70E+08	1.0	17300.0
3183.	c10h20rCqE=c10h20rGqE	9.90E+07	1.0	12000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	9.90E+07	1.0	12000.0
3184.	c10h20rCqE=c10h20rHqE	1.70E+07	1.0	17400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.70E+07	1.0	17400.0
3185.	c10h20rCqE=c10h20rIqE	2.90E+06	1.0	20900.0
3186.	c10h20rDqE=c10h20rAqE	8.60E+08	1.0	19800.0
3187.	c10h20rDqE=c10h20rGqE	5.70E+08	1.0	17300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.70E+08	1.0	17300.0
3188.	c10h20rDqE=c10h20rHqE	9.90E+07	1.0	12000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	9.90E+07	1.0	12000.0
3189.	c10h20rDqE=c10h20rIqE	1.70E+07	1.0	17400.0
3190.	c10h20rDqE=c10h20rJqE	4.40E+06	1.0	23400.0
3191.	c10h20rFqE=c10h20rIqE	5.70E+08	1.0	17300.0
3192.	c10h20rFqE=c10h20rJqE	1.50E+08	1.0	14500.0
3193.	c10h20rGqE=c10h20rJqE	8.60E+08	1.0	19800.0
3194.	c10h20rHqE=c10h20rEqE	2.90E+08	1.0	15300.0
3195.	c10h20rIqE=c10h20rEqE	4.90E+07	1.0	10000.0
3196.	c10h20rJqE=c10h20rEqE	8.50E+06	1.0	15400.0
3197.	c10h20rAqA+o2=c10h20qjAqA	2.50E+11	0.0	0.0
3198.	c10h20rBqA+o2=c10h20qjBqA	2.50E+11	0.0	0.0
3199.	c10h20rCqA+o2=c10h20qjCqA	2.50E+11	0.0	0.0
3200.	c10h20rDqA+o2=c10h20qjDqA	2.50E+11	0.0	0.0
3201.	c10h20rEqA+o2=c10h20qjEqA	2.50E+11	0.0	0.0
3202.	c10h20rFqA+o2=c10h20qjFqA	2.50E+11	0.0	0.0
3203.	c10h20rGqA+o2=c10h20qjGqA	2.50E+11	0.0	0.0
3204.	c10h20rHqA+o2=c10h20qjHqA	2.50E+11	0.0	0.0
3205.	c10h20rIqA+o2=c10h20qjIqA	2.50E+11	0.0	0.0
3206.	c10h20rJqA+o2=c10h20qjJqA	2.50E+11	0.0	0.0
3207.	c10h20rAqB+o2=c10h20qjAqB	2.50E+11	0.0	0.0
3208.	c10h20rBqB+o2=c10h20qjBqB	2.50E+11	0.0	0.0
3209.	c10h20rCqB+o2=c10h20qjCqB	2.50E+11	0.0	0.0
3210.	c10h20rDqB+o2=c10h20qjDqB	2.50E+11	0.0	0.0
3211.	c10h20rEqB+o2=c10h20qjEqB	2.50E+11	0.0	0.0
3212.	c10h20rFqB+o2=c10h20qjFqB	2.50E+11	0.0	0.0
3213.	c10h20rGqB+o2=c10h20qjGqB	2.50E+11	0.0	0.0
3214.	c10h20rHqB+o2=c10h20qjHqB	2.50E+11	0.0	0.0
3215.	c10h20rIqB+o2=c10h20qjIqB	2.50E+11	0.0	0.0
3216.	c10h20rJqB+o2=c10h20qjJqB	2.50E+11	0.0	0.0
3217.	c10h20rAqC+o2=c10h20qjAqC	2.50E+11	0.0	0.0
3218.	c10h20rBqC+o2=c10h20qjBqC	2.50E+11	0.0	0.0
3219.	c10h20rCqC+o2=c10h20qjCqC	2.50E+11	0.0	0.0
3220.	c10h20rDqC+o2=c10h20qjDqC	2.50E+11	0.0	0.0
3221.	c10h20rEqC+o2=c10h20qjEqC	2.50E+11	0.0	0.0
3222.	c10h20rFqC+o2=c10h20qjFqC	2.50E+11	0.0	0.0
3223.	c10h20rGqC+o2=c10h20qjGqC	2.50E+11	0.0	0.0
3224.	c10h20rHqC+o2=c10h20qjHqC	2.50E+11	0.0	0.0
3225.	c10h20rIqC+o2=c10h20qjIqC	2.50E+11	0.0	0.0
3226.	c10h20rJqC+o2=c10h20qjJqC	2.50E+11	0.0	0.0
3227.	c10h20rAqD+o2=c10h20qjAqD	2.50E+11	0.0	0.0
3228.	c10h20rBqD+o2=c10h20qjBqD	2.50E+11	0.0	0.0
3229.	c10h20rCqD+o2=c10h20qjCqD	2.50E+11	0.0	0.0
3230.	c10h20rDqD+o2=c10h20qjDqD	2.50E+11	0.0	0.0
3231.	c10h20rEqD+o2=c10h20qjEqD	2.50E+11	0.0	0.0
3232.	c10h20rFqD+o2=c10h20qjFqD	2.50E+11	0.0	0.0
3233.	c10h20rGqD+o2=c10h20qjGqD	2.50E+11	0.0	0.0
3234.	c10h20rHqD+o2=c10h20qjHqD	2.50E+11	0.0	0.0
3235.	c10h20rIqD+o2=c10h20qjIqD	2.50E+11	0.0	0.0
3236.	c10h20rJqD+o2=c10h20qjJqD	2.50E+11	0.0	0.0
3237.	c10h20rAqE+o2=c10h20qjAqE	2.50E+11	0.0	0.0
3238.	c10h20rBqE+o2=c10h20qjBqE	2.50E+11	0.0	0.0
3239.	c10h20rCqE+o2=c10h20qjCqE	2.50E+11	0.0	0.0
3240.	c10h20rDqE+o2=c10h20qjDqE	2.50E+11	0.0	0.0
3241.	c10h20rEqE+o2=c10h20qjEqE	2.50E+11	0.0	0.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

3242.	c10h20rFqE+o2=c10h20qjFqE	2.50E+11	0.0	0.0
3243.	c10h20rGqE+o2=c10h20qjGqE	2.50E+11	0.0	0.0
3244.	c10h20rHqE+o2=c10h20qjHqE	2.50E+11	0.0	0.0
3245.	c10h20rIqE+o2=c10h20qjIqE	2.50E+11	0.0	0.0
3246.	c10h20rJqE+o2=c10h20qjJqE	2.50E+11	0.0	0.0
3247.	c10h20rCqA=>oh+ch2o+c9h18	5.00E+13	0.0	25500.0
3248.	c10h20rDqB=>oh+ch3hco+c8h16	5.00E+13	0.0	25500.0
3249.	c10h20rAqC=>oh+c7h15hco+c2h4	5.00E+13	0.0	25500.0
3250.	c10h20rEqC=>oh+ethco+c7h14	5.00E+13	0.0	25500.0
3251.	c10h20rBqD=>oh+c6h13hco+c3h6	5.00E+13	0.0	25500.0
3252.	c10h20rFqD=>oh+nc3h7hco+c6h12	5.00E+13	0.0	25500.0
3253.	c10h20rCqE=>oh+c5h11hco+c4h8	5.00E+13	0.0	25500.0
3254.	c10h20rGqE=>oh+nc4h9hco+c5h10	5.00E+13	0.0	25500.0
3255.	c10h20rAqA=oh+c9h19hco	1.00E+09	0.0	7500.0
3256.	c10h20rBqB=oh+c10h20oB	1.00E+09	0.0	7500.0
3257.	c10h20rCqC=oh+c10h20oC	1.00E+09	0.0	7500.0
3258.	c10h20rDqD=oh+c10h20oD	1.00E+09	0.0	7500.0
3259.	c10h20rEqE=oh+c10h20oE	1.00E+09	0.0	7500.0
3260.	c10h20rBqA=oh+c10h20o-AB	2.95E+11	0.0	22000.0
3261.	c10h20rCqA=oh+c10h20o-AC	2.50E+10	0.0	15250.0
3262.	c10h20rDqA=oh+c10h20o-AD	2.10E+08	0.0	6500.0
3263.	c10h20rEqA=oh+c10h20o-AE	1.50E+08	0.0	1800.0
3264.	c10h20rAqB=oh+c10h20o-AB	2.95E+11	0.0	22000.0
3265.	c10h20rCqB=oh+c10h20o-BC	2.95E+11	0.0	22000.0
3266.	c10h20rDqB=oh+c10h20o-BD	2.50E+10	0.0	15250.0
3267.	c10h20rEqB=oh+c10h20o-BE	2.10E+08	0.0	6500.0
3268.	c10h20rFqB=oh+c10h20o-BF	1.50E+08	0.0	1800.0
3269.	c10h20rAqC=oh+c10h20o-AC	2.50E+10	0.0	15250.0
3270.	c10h20rBqC=oh+c10h20o-BC	2.95E+11	0.0	22000.0
3271.	c10h20rDqC=oh+c10h20o-CD	2.95E+11	0.0	22000.0
3272.	c10h20rEqC=oh+c10h20o-CE	2.50E+10	0.0	15250.0
3273.	c10h20rFqC=oh+c10h20o-CF	2.10E+08	0.0	6500.0
3274.	c10h20rGqC=oh+c10h20o-CG	1.50E+08	0.0	1800.0
3275.	c10h20rAqD=oh+c10h20o-AD	2.10E+08	0.0	6500.0
3276.	c10h20rBqD=oh+c10h20o-BD	2.50E+10	0.0	15250.0
3277.	c10h20rCqD=oh+c10h20o-CD	2.95E+11	0.0	22000.0
3278.	c10h20rEqD=oh+c10h20o-DE	2.95E+11	0.0	22000.0
3279.	c10h20rFqD=oh+c10h20o-DF	2.50E+10	0.0	15250.0
3280.	c10h20rGqD=oh+c10h20o-DG	2.10E+08	0.0	6500.0
3281.	c10h20rHqD=oh+c10h20o-CG	1.50E+08	0.0	1800.0
3282.	c10h20rAqE=oh+c10h20o-AE	1.50E+08	0.0	1800.0
3283.	c10h20rBqE=oh+c10h20o-BE	2.10E+08	0.0	6500.0
3284.	c10h20rCqE=oh+c10h20o-CE	2.50E+10	0.0	15250.0
3285.	c10h20rDqE=oh+c10h20o-DE	2.95E+11	0.0	22000.0
3286.	c10h20rFqE=oh+c10h20o-EF	2.95E+11	0.0	22000.0
3287.	c10h20rGqE=oh+c10h20o-DF	2.50E+10	0.0	15250.0
3288.	c10h20rHqE=oh+c10h20o-CF	2.10E+08	0.0	6500.0
3289.	c10h20rIqE=oh+c10h20o-BF	1.50E+08	0.0	1800.0
3290.	c10h20rAqB=ho2+c10h20-1	8.50E+12	0.0	26000.0
3291.	c10h20rBqA=ho2+c10h20-1	8.50E+12	0.0	26000.0
3292.	c10h20rBqC=ho2+c10h20-2	8.50E+12	0.0	26000.0
3293.	c10h20rCqB=ho2+c10h20-2	8.50E+12	0.0	26000.0
3294.	c10h20rCqD=ho2+c10h20-3	8.50E+12	0.0	26000.0
3295.	c10h20rDqC=ho2+c10h20-3	8.50E+12	0.0	26000.0
3296.	c10h20rDqE=ho2+c10h20-4	8.50E+12	0.0	26000.0
3297.	c10h20rEqD=ho2+c10h20-4	8.50E+12	0.0	26000.0
3298.	c10h20rFqE=ho2+c10h20-5	8.50E+12	0.0	26000.0
3299.	c10h20qjAqA=oh+c10h19oAqA	9.73E+09	1.0	38000.0
3300.	c10h20qjBqA=oh+c10h19oAqB	3.35E+09	1.0	33500.0
3301.	c10h20qjCqA=oh+c10h19oAqC	5.75E+08	1.0	26000.0
3302.	c10h20qjDqA=oh+c10h19oAqD	9.89E+07	1.0	23000.0
3303.	c10h20qjEqA=oh+c10h19oAqE	1.70E+07	1.0	22000.0
3304.	c10h20qjAqB=oh+c10h19oBqA	1.67E+09	1.0	30500.0
3305.	c10h20qjCqB=oh+c10h19oBqC	1.67E+09	1.0	30500.0
3306.	c10h20qjCqB=oh+c10h19oBqD	2.87E+08	1.0	23000.0
3307.	c10h20qjEqB=oh+c10h19oBqE	4.94E+07	1.0	20000.0
3308.	c10h20qjFqB=oh+c10h19oBqF	8.49E+06	1.0	19000.0
3309.	c10h20qjAqC=oh+c10h19oCqA	2.87E+08	1.0	23000.0
3310.	c10h20qjBqC=oh+c10h19oCqB	1.67E+09	1.0	30500.0
3311.	c10h20qjDqC=oh+c10h19oCqD	1.67E+09	1.0	30500.0
3312.	c10h20qjEqC=oh+c10h19oCqE	2.87E+08	1.0	23000.0
3313.	c10h20qjFqC=oh+c10h19oCqF	4.94E+07	1.0	20000.0
3314.	c10h20qjGqC=oh+c10h19oCqG	8.49E+06	1.0	19000.0
3315.	c10h20qjAqD=oh+c10h19oDqA	4.94E+07	1.0	20000.0
3316.	c10h20qjBqD=oh+c10h19oDqB	2.87E+08	1.0	23000.0
3317.	c10h20qjCqD=oh+c10h19oDqC	1.67E+09	1.0	30500.0
3318.	c10h20qjEqD=oh+c10h19oDqE	1.67E+09	1.0	30500.0
3319.	c10h20qjFqD=oh+c10h19oDqF	2.87E+08	1.0	23000.0
3320.	c10h20qjGqD=oh+c10h19oDqG	4.94E+07	1.0	20000.0
3321.	c10h20qjHqD=oh+c10h19oDqH	8.49E+06	1.0	19000.0
3322.	c10h20qjAqE=oh+c10h19oEqA	8.49E+06	1.0	19000.0
3323.	c10h20qjBqE=oh+c10h19oEqB	4.94E+07	1.0	20000.0
3324.	c10h20qjCqE=oh+c10h19oEqC	2.87E+08	1.0	23000.0
3325.	c10h20qjDqE=oh+c10h19oEqD	1.67E+09	1.0	30500.0
3326.	c10h20qjFqE=oh+c10h19oEqF	1.67E+09	1.0	30500.0
3327.	c10h20qjGqE=oh+c10h19oEqG	2.87E+08	1.0	23000.0
3328.	c10h20qjHqE=oh+c10h19oEqH	4.94E+07	1.0	20000.0
3329.	c10h20qjIqE=oh+c10h19oEqI	8.49E+06	1.0	19000.0
3330.	c10h21o2h=>oh+ch3hco+3c2h4+c2h5	1.50E+16	0.0	42000.0
3331.	c10h19o2h=>oh+ch3hco+3c2h4+c2h3	1.50E+16	0.0	42000.0
3332.	c10h19oAqA=oh+co2+Ac9h19	1.00E+16	0.0	43000.0
3333.	c10h19oAqB=oh+hco+c8h17hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3334.	c10h19oAqC=oh+ch2hco+c7h15hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3335.	c10h19oAqD=oh+ch2ch2hco+c6h13hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3336.	c10h19oAqE=oh+ch2ch2ch2hco+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3337.	c10h19oBqA=oh+ch2o+c8h17co	1.00E+16	0.0	43000.0
3338.	c10h19oBqC=oh+ch3co+c7h15hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3339.	c10h19oBqD=oh+ch2coch3+c6h13hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3340.	c10h19oBqE=oh+ch3coc2h4+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3341.	c10h19oBqF=oh+Ec5oB+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3342.	c10h19oCqA=oh+ch2o+Ac9oB	1.00E+16	0.0	43000.0
3343.	c10h19oCqB=oh+ch3hco+c7h15co	1.00E+16	0.0	43000.0
3344.	c10h19oCqD=oh+c2h5co+c6h13hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3345.	c10h19oCqE=oh+c2h5coch2+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

3346.	c10h19oCqF=oh+c2h5coc2h4+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3347.	c10h19oCqG=oh+Fc6oC+nc3h7hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3348.	c10h19oDqA=oh+ch2o+Ac9oC	1.00E+16	0.0	43000.0
3349.	c10h19oDqB=oh+ch3hco+Ac8oB	1.00E+16	0.0	43000.0
3350.	c10h19oDqC=oh+ethco+c6h13co	1.00E+16	0.0	43000.0
3351.	c10h19oDqE=oh+c3h7co+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3352.	c10h19oDqF=oh+nc4h9hco+Ac5oB	1.00E+16	0.0	43000.0
3353.	c10h19oDqG=oh+nc3h7hco+c3h7coch2ch2	1.00E+16	0.0	43000.0
3354.	c10h19oDqH=oh+ethco+Ac7oD	1.00E+16	0.0	43000.0
3355.	c10h19oEqA=oh+ch2o+c2h4+ch2co+Ac5h11	1.00E+16	0.0	43000.0
3356.	c10h19oEqB=oh+ch3hco+c5h11coc2h4	1.00E+16	0.0	43000.0
3357.	c10h19oEqC=oh+ethco+ch2co+Ac5h11	1.00E+16	0.0	43000.0
3358.	c10h19oEqD=oh+nc3h7hco+c5h11co	1.00E+16	0.0	43000.0
3359.	c10h19oEqF=oh+nc4h9co+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3360.	c10h19oEqG=oh+nc3h7hco+ch2co+pc4h9	1.00E+16	0.0	43000.0
3361.	c10h19oEqH=oh+ethco+Ac7oC	1.00E+16	0.0	43000.0
3362.	c10h19oEqI=oh+ch3hco+c2h4+ch2co+pc4h9	1.00E+16	0.0	43000.0
3363.	c10h20o-AB+H=H2+Ac10h19oB	2.70E+07	2.0	5000.0
3364.	c10h20o-AB+oh=h2o+Ac10h19oB	1.25E+12	0.0	0.0
3365.	c10h20o-AB+ho2=h2o2+Ac10h19oB	1.20E+12	0.0	15500.0
3366.	c10h20o-AB+ch3=ch4+Ac10h19oB	6.00E+11	0.0	9600.0
3367.	c10h20o-AB+ch3o2=ch3o2h+Ac10h19oB	6.00E+11	0.0	9600.0
3368.	c10h20o-AB+c2h5=c2h6+Ac10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
3369.	c10h20o-AB+O=oh+Ac10h19oB	7.80E+13	0.0	5200.0
3370.	c10h20o-AB+H=H2+Bc10h19oA	2.70E+07	2.0	5000.0
3371.	c10h20o-AB+oh=h2o+Bc10h19oA	1.25E+12	0.0	0.0
3372.	c10h20o-AB+ho2=h2o2+Bc10h19oA	1.20E+12	0.0	15500.0
3373.	c10h20o-AB+ch3=ch4+Bc10h19oA	6.00E+11	0.0	9600.0
3374.	c10h20o-AB+ch3o2=ch3o2h+Bc10h19oA	6.00E+11	0.0	9600.0
3375.	c10h20o-AB+c2h5=c2h6+Bc10h19oA	6.00E+11	0.0	11000.0
3376.	c10h20o-AB+O=oh+Bc10h19oA	7.80E+13	0.0	5200.0
3377.	c10h20o-BC+H=H2+Bc10h19oC	2.70E+07	2.0	5000.0
3378.	c10h20o-BC+oh=h2o+Bc10h19oC	1.25E+12	0.0	0.0
3379.	c10h20o-BC+ho2=h2o2+Bc10h19oC	1.20E+12	0.0	15500.0
3380.	c10h20o-BC+ch3=ch4+Bc10h19oC	6.00E+11	0.0	9600.0
3381.	c10h20o-BC+ch3o2=ch3o2h+Bc10h19oC	6.00E+11	0.0	9600.0
3382.	c10h20o-BC+c2h5=c2h6+Bc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
3383.	c10h20o-BC+O=oh+Bc10h19oC	7.80E+13	0.0	5200.0
3384.	c10h20o-BC+H=H2+Cc10h19oB	2.70E+07	2.0	5000.0
3385.	c10h20o-BC+oh=h2o+Cc10h19oB	1.25E+12	0.0	0.0
3386.	c10h20o-BC+ho2=h2o2+Cc10h19oB	1.20E+12	0.0	15500.0
3387.	c10h20o-BC+ch3=ch4+Cc10h19oB	6.00E+11	0.0	9600.0
3388.	c10h20o-BC+ch3o2=ch3o2h+Cc10h19oB	6.00E+11	0.0	9600.0
3389.	c10h20o-BC+c2h5=c2h6+Cc10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
3390.	c10h20o-BC+O=oh+Cc10h19oB	7.80E+13	0.0	5200.0
3391.	c10h20o-CD+H=H2+Cc10h19oD	2.70E+07	2.0	5000.0
3392.	c10h20o-CD+oh=h2o+Cc10h19oD	1.25E+12	0.0	0.0
3393.	c10h20o-CD+ho2=h2o2+Cc10h19oD	1.20E+12	0.0	15500.0
3394.	c10h20o-CD+ch3=ch4+Cc10h19oD	6.00E+11	0.0	9600.0
3395.	c10h20o-CD+ch3o2=ch3o2h+Cc10h19oD	6.00E+11	0.0	9600.0
3396.	c10h20o-CD+c2h5=c2h6+Cc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
3397.	c10h20o-CD+O=oh+Cc10h19oD	7.80E+13	0.0	5200.0
3398.	c10h20o-CD+H=H2+Dc10h19oC	2.70E+07	2.0	5000.0
3399.	c10h20o-CD+oh=h2o+Dc10h19oC	1.25E+12	0.0	0.0
3400.	c10h20o-CD+ho2=h2o2+Dc10h19oC	1.20E+12	0.0	15500.0
3401.	c10h20o-CD+ch3=ch4+Dc10h19oC	6.00E+11	0.0	9600.0
3402.	c10h20o-CD+ch3o2=ch3o2h+Dc10h19oC	6.00E+11	0.0	9600.0
3403.	c10h20o-CD+c2h5=c2h6+Dc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
3404.	c10h20o-CD+O=oh+Dc10h19oC	7.80E+13	0.0	5200.0
3405.	c10h20o-DE+H=H2+Dc10h19oE	2.70E+07	2.0	5000.0
3406.	c10h20o-DE+oh=h2o+Dc10h19oE	1.25E+12	0.0	0.0
3407.	c10h20o-DE+ho2=h2o2+Dc10h19oE	1.20E+12	0.0	15500.0
3408.	c10h20o-DE+ch3=ch4+Dc10h19oE	6.00E+11	0.0	9600.0
3409.	c10h20o-DE+ch3o2=ch3o2h+Dc10h19oE	6.00E+11	0.0	9600.0
3410.	c10h20o-DE+c2h5=c2h6+Dc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
3411.	c10h20o-DE+O=oh+Dc10h19oE	7.80E+13	0.0	5200.0
3412.	c10h20o-DE+H=H2+Ec10h19oD	2.70E+07	2.0	5000.0
3413.	c10h20o-DE+oh=h2o+Ec10h19oD	1.25E+12	0.0	0.0
3414.	c10h20o-DE+ho2=h2o2+Ec10h19oD	1.20E+12	0.0	15500.0
3415.	c10h20o-DE+ch3=ch4+Ec10h19oD	6.00E+11	0.0	9600.0
3416.	c10h20o-DE+ch3o2=ch3o2h+Ec10h19oD	6.00E+11	0.0	9600.0
3417.	c10h20o-DE+c2h5=c2h6+Ec10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
3418.	c10h20o-DE+O=oh+Ec10h19oD	7.80E+13	0.0	5200.0
3419.	c10h20o-EF+H=H2+Fc10h19oE	5.40E+07	2.0	5000.0
3420.	c10h20o-EF+oh=h2o+Fc10h19oE	1.25E+12	0.0	0.0
3421.	c10h20o-EF+ho2=h2o2+Fc10h19oE	2.40E+12	0.0	15500.0
3422.	c10h20o-EF+ch3=ch4+Fc10h19oE	1.20E+12	0.0	9600.0
3423.	c10h20o-EF+ch3o2=ch3o2h+Fc10h19oE	1.20E+12	0.0	9600.0
3424.	c10h20o-EF+c2h5=c2h6+Fc10h19oE	1.20E+12	0.0	11000.0
3425.	c10h20o-EF+O=oh+Fc10h19oE	1.56E+14	0.0	5200.0
3426.	c10h20o-AC+H=H2+Cc10h19oA	2.70E+07	2.0	5000.0
3427.	c10h20o-AC+oh=h2o+Cc10h19oA	1.25E+12	0.0	0.0
3428.	c10h20o-AC+ho2=h2o2+Cc10h19oA	1.20E+12	0.0	15500.0
3429.	c10h20o-AC+ch3=ch4+Cc10h19oA	6.00E+11	0.0	9600.0
3430.	c10h20o-AC+ch3o2=ch3o2h+Cc10h19oA	6.00E+11	0.0	9600.0
3431.	c10h20o-AC+c2h5=c2h6+Cc10h19oA	6.00E+11	0.0	11000.0
3432.	c10h20o-AC+H=H2+Fc10h19oE	2.70E+07	2.0	5000.0
3433.	c10h20o-AC+oh=h2o+Fc10h19oE	1.25E+12	0.0	0.0
3434.	c10h20o-AC+ho2=h2o2+Fc10h19oE	1.20E+12	0.0	15500.0
3435.	c10h20o-AC+ch3=ch4+Fc10h19oE	6.00E+11	0.0	9600.0
3436.	c10h20o-AC+ch3o2=ch3o2h+Fc10h19oE	6.00E+11	0.0	9600.0
3437.	c10h20o-AC+c2h5=c2h6+Fc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
3438.	c10h20o-BD+H=H2+Dc10h19oB	2.70E+07	2.0	5000.0
3439.	c10h20o-BD+oh=h2o+Dc10h19oB	1.25E+12	0.0	0.0
3440.	c10h20o-BD+ho2=h2o2+Dc10h19oB	1.20E+12	0.0	15500.0
3441.	c10h20o-BD+ch3=ch4+Dc10h19oB	6.00E+11	0.0	9600.0
3442.	c10h20o-BD+ch3o2=ch3o2h+Dc10h19oB	6.00E+11	0.0	9600.0
3443.	c10h20o-BD+c2h5=c2h6+Dc10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
3444.	c10h20o-BD+H=H2+Bc10h19oD	2.70E+07	2.0	5000.0
3445.	c10h20o-BD+oh=h2o+Bc10h19oD	1.25E+12	0.0	0.0
3446.	c10h20o-BD+ho2=h2o2+Bc10h19oD	1.20E+12	0.0	15500.0
3447.	c10h20o-BD+ch3=ch4+Bc10h19oD	6.00E+11	0.0	9600.0
3448.	c10h20o-BD+ch3o2=ch3o2h+Bc10h19oD	6.00E+11	0.0	9600.0
3449.	c10h20o-BD+c2h5=c2h6+Bc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

3450.	c10h20o-CE+H=H2+Ec10h19oC	2.70E+07	2.0	5000.0
3451.	c10h20o-CE+oh=h2o+Ec10h19oC	1.25E+12	0.0	0.0
3452.	c10h20o-CE+ho2=h2o2+Ec10h19oC	1.20E+12	0.0	15500.0
3453.	c10h20o-CE+ch3=ch4+Ec10h19oC	6.00E+11	0.0	9600.0
3454.	c10h20o-CE+ch3o2=ch3o2h+Ec10h19oC	6.00E+11	0.0	9600.0
3455.	c10h20o-CE+c2h5=c2h6+Ec10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
3456.	c10h20o-CE+H=H2+Cc10h19oE	2.70E+07	2.0	5000.0
3457.	c10h20o-CE+oh=h2o+Cc10h19oE	1.25E+12	0.0	0.0
3458.	c10h20o-CE+ho2=h2o2+Cc10h19oE	1.20E+12	0.0	15500.0
3459.	c10h20o-CE+ch3=ch4+Cc10h19oE	6.00E+11	0.0	9600.0
3460.	c10h20o-CE+ch3o2=ch3o2h+Cc10h19oE	6.00E+11	0.0	9600.0
3461.	c10h20o-CE+c2h5=c2h6+Cc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
3462.	c10h20o-DF+H=H2+Fc10h19oD	2.70E+07	2.0	5000.0
3463.	c10h20o-DF+oh=h2o+Fc10h19oD	1.25E+12	0.0	0.0
3464.	c10h20o-DF+ho2=h2o2+Fc10h19oD	1.20E+12	0.0	15500.0
3465.	c10h20o-DF+ch3=ch4+Fc10h19oD	6.00E+11	0.0	9600.0
3466.	c10h20o-DF+ch3o2=ch3o2h+Fc10h19oD	6.00E+11	0.0	9600.0
3467.	c10h20o-DF+c2h5=c2h6+Fc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
3468.	c10h20o-DF+H=H2+Dc10h19oF	2.70E+07	2.0	5000.0
3469.	c10h20o-DF+oh=h2o+Dc10h19oF	1.25E+12	0.0	0.0
3470.	c10h20o-DF+ho2=h2o2+Dc10h19oF	1.20E+12	0.0	15500.0
3471.	c10h20o-DF+ch3=ch4+Dc10h19oF	6.00E+11	0.0	9600.0
3472.	c10h20o-DF+ch3o2=ch3o2h+Dc10h19oF	6.00E+11	0.0	9600.0
3473.	c10h20o-DF+c2h5=c2h6+Dc10h19oF	6.00E+11	0.0	11000.0
3474.	c10h20o-AD+H=H2+Ac10h19oD	2.70E+07	2.0	5000.0
3475.	c10h20o-AD+oh=h2o+Ac10h19oD	1.25E+12	0.0	0.0
3476.	c10h20o-AD+ho2=h2o2+Ac10h19oD	1.20E+12	0.0	15500.0
3477.	c10h20o-AD+ch3=ch4+Ac10h19oD	6.00E+11	0.0	9600.0
3478.	c10h20o-AD+ch3o2=ch3o2h+Ac10h19oD	6.00E+11	0.0	9600.0
3479.	c10h20o-AD+c2h5=c2h6+Ac10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
3480.	c10h20o-BE+H=H2+Ec10h19oB	2.70E+07	2.0	5000.0
3481.	c10h20o-BE+oh=h2o+Ec10h19oB	1.25E+12	0.0	0.0
3482.	c10h20o-BE+ho2=h2o2+Ec10h19oB	1.20E+12	0.0	15500.0
3483.	c10h20o-BE+ch3=ch4+Ec10h19oB	6.00E+11	0.0	9600.0
3484.	c10h20o-BE+ch3o2=ch3o2h+Ec10h19oB	6.00E+11	0.0	9600.0
3485.	c10h20o-BE+c2h5=c2h6+Ec10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
3486.	c10h20o-BE+H=H2+Bc10h19oE	2.70E+07	2.0	5000.0
3487.	c10h20o-BE+oh=h2o+Bc10h19oE	1.25E+12	0.0	0.0
3488.	c10h20o-BE+ho2=h2o2+Bc10h19oE	1.20E+12	0.0	15500.0
3489.	c10h20o-BE+ch3=ch4+Bc10h19oE	6.00E+11	0.0	9600.0
3490.	c10h20o-BE+ch3o2=ch3o2h+Bc10h19oE	6.00E+11	0.0	9600.0
3491.	c10h20o-BE+c2h5=c2h6+Bc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
3492.	c10h20o-CF+H=H2+Fc10h19oC	2.70E+07	2.0	5000.0
3493.	c10h20o-CF+oh=h2o+Fc10h19oC	1.25E+12	0.0	0.0
3494.	c10h20o-CF+ho2=h2o2+Fc10h19oC	1.20E+12	0.0	15500.0
3495.	c10h20o-CF+ch3=ch4+Fc10h19oC	6.00E+11	0.0	9600.0
3496.	c10h20o-CF+ch3o2=ch3o2h+Fc10h19oC	6.00E+11	0.0	9600.0
3497.	c10h20o-CF+c2h5=c2h6+Fc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
3498.	c10h20o-CF+H=H2+Cc10h19oF	2.70E+07	2.0	5000.0
3499.	c10h20o-CF+oh=h2o+Cc10h19oF	1.25E+12	0.0	0.0
3500.	c10h20o-CF+ho2=h2o2+Cc10h19oF	1.20E+12	0.0	15500.0
3501.	c10h20o-CF+ch3=ch4+Cc10h19oF	6.00E+11	0.0	9600.0
3502.	c10h20o-CF+ch3o2=ch3o2h+Cc10h19oF	6.00E+11	0.0	9600.0
3503.	c10h20o-CF+c2h5=c2h6+Cc10h19oF	6.00E+11	0.0	11000.0
3504.	c10h20o-DG+H=H2+Gc10h19oD	5.40E+07	2.0	5000.0
3505.	c10h20o-DG+oh=h2o+Gc10h19oD	2.50E+12	0.0	0.0
3506.	c10h20o-DG+ho2=h2o2+Gc10h19oD	2.40E+12	0.0	15500.0
3507.	c10h20o-DG+ch3=ch4+Gc10h19oD	1.20E+12	0.0	9600.0
3508.	c10h20o-DG+ch3o2=ch3o2h+Gc10h19oD	1.20E+12	0.0	9600.0
3509.	c10h20o-DG+c2h5=c2h6+Gc10h19oD	1.20E+12	0.0	11000.0
3510.	c10h20o-AE+H=H2+Ac10h19oE	5.40E+07	2.0	5000.0
3511.	c10h20o-AE+oh=h2o+Ac10h19oE	1.25E+12	0.0	0.0
3512.	c10h20o-AE+ho2=h2o2+Ac10h19oE	2.40E+12	0.0	15500.0
3513.	c10h20o-AE+ch3=ch4+Ac10h19oE	1.20E+12	0.0	9600.0
3514.	c10h20o-AE+ch3o2=ch3o2h+Ac10h19oE	1.20E+12	0.0	9600.0
3515.	c10h20o-AE+c2h5=c2h6+Ac10h19oE	1.20E+12	0.0	11000.0
3516.	c10h20o-AE+H=H2+Ec10h19oA	2.70E+07	2.0	5000.0
3517.	c10h20o-AE+oh=h2o+Ec10h19oA	1.25E+12	0.0	0.0
3518.	c10h20o-AE+ho2=h2o2+Ec10h19oA	1.20E+12	0.0	15500.0
3519.	c10h20o-AE+ch3=ch4+Ec10h19oA	6.00E+11	0.0	9600.0
3520.	c10h20o-AE+ch3o2=ch3o2h+Ec10h19oA	6.00E+11	0.0	9600.0
3521.	c10h20o-AE+c2h5=c2h6+Ec10h19oA	6.00E+11	0.0	11000.0
3522.	c10h20o-BF+H=H2+Fc10h19oB	2.70E+07	2.0	5000.0
3523.	c10h20o-BF+oh=h2o+Fc10h19oB	1.25E+12	0.0	0.0
3524.	c10h20o-BF+ho2=h2o2+Fc10h19oB	1.20E+12	0.0	15500.0
3525.	c10h20o-BF+ch3=ch4+Fc10h19oB	6.00E+11	0.0	9600.0
3526.	c10h20o-BF+ch3o2=ch3o2h+Fc10h19oB	6.00E+11	0.0	9600.0
3527.	c10h20o-BF+c2h5=c2h6+Fc10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
3528.	c10h20o-BF+H=H2+Bc10h19oF	2.70E+07	2.0	5000.0
3529.	c10h20o-BF+oh=h2o+Bc10h19oF	1.25E+12	0.0	0.0
3530.	c10h20o-BF+ho2=h2o2+Bc10h19oF	1.20E+12	0.0	15500.0
3531.	c10h20o-BF+ch3=ch4+Bc10h19oF	6.00E+11	0.0	9600.0
3532.	c10h20o-BF+ch3o2=ch3o2h+Bc10h19oF	6.00E+11	0.0	9600.0
3533.	c10h20o-BF+c2h5=c2h6+Bc10h19oF	6.00E+11	0.0	11000.0
3534.	c10h20o-CG+H=H2+Gc10h19oC	2.70E+07	2.0	5000.0
3535.	c10h20o-CG+oh=h2o+Gc10h19oC	1.25E+12	0.0	0.0
3536.	c10h20o-CG+ho2=h2o2+Gc10h19oC	1.20E+12	0.0	15500.0
3537.	c10h20o-CG+ch3=ch4+Gc10h19oC	6.00E+11	0.0	9600.0
3538.	c10h20o-CG+ch3o2=ch3o2h+Gc10h19oC	6.00E+11	0.0	9600.0
3539.	c10h20o-CG+c2h5=c2h6+Gc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
3540.	c10h20o-CG+H=H2+Hc10h19oD	2.70E+07	2.0	5000.0
3541.	c10h20o-CG+oh=h2o+Hc10h19oD	1.25E+12	0.0	0.0
3542.	c10h20o-CG+ho2=h2o2+Hc10h19oD	1.20E+12	0.0	15500.0
3543.	c10h20o-CG+ch3=ch4+Hc10h19oD	6.00E+11	0.0	9600.0
3544.	c10h20o-CG+ch3o2=ch3o2h+Hc10h19oD	6.00E+11	0.0	9600.0
3545.	c10h20o-CG+c2h5=c2h6+Hc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
3546.	Ac10h19oB=ch2co+Ac8h17	2.00E+13	0.0	27100.0
3547.	Bc10h19oA=acrol+Ac7h15	2.00E+13	0.0	23300.0
3548.	Bc10h19oC=ch3chco+Ac7h15	2.00E+13	0.0	50700.0
3549.	Cc10h19oB=MVK+Ac6h13	2.00E+13	0.0	29900.0
3550.	Dc10h19oC=etvinket+Ac5h11	2.00E+13	0.0	30000.0
3551.	Ac10h19oC=c2h4+c7h15co	2.00E+13	0.0	28800.0
3552.	Cc10h19oA=hco+c9h18	2.00E+13	0.0	28800.0
3553.	Bc10h19oD=c3h6+c6h13co	2.00E+13	0.0	28800.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

3554.	Dc10h19oB=ch3co+c8h16	2.00E+13	0.0	28800.0
3555.	Cc10h19oE=c4h8+c5h11co	2.00E+13	0.0	28800.0
3556.	Ec10h19oC=c2h5co+c7h14	2.00E+13	0.0	28800.0
3557.	Dc10h19oF=c5h10+nc4h9co	2.00E+13	0.0	28800.0
3558.	Fc10h19oD=c3h7co+c6h12	2.00E+13	0.0	28800.0
3559.	Dc10h19oA=ch2hco+c8h16	2.00E+13	0.0	28800.0
3560.	Ac10h19oD=c2h4+Ac6h13+ch2co	2.00E+13	0.0	28800.0
3561.	Ec10h19oB=ch2coch3+c7h14	2.00E+13	0.0	28800.0
3562.	Bc10h19oE=c3h6+Ac5h11+ch2co	2.00E+13	0.0	28800.0
3563.	Gc10h19oD=Ac5oB+c5h10	5.00E+13	0.0	28800.0
3564.	Fc10h19oC=c2h5coch2+c6h12	5.00E+13	0.0	28800.0
3565.	Cc10h19oF=pc4h9+ch2co+c4h8	5.00E+13	0.0	28800.0
3566.	Ac10h19oE=c2h4+c5h11coc2h4	5.00E+13	0.0	45000.0
3567.	Ec10h19oA=c7h14+ch2ch2hco	5.00E+13	0.0	29600.0
3568.	Fc10h19oB=ch3coc2h4+c6h12	5.00E+13	0.0	29000.0
3569.	Bc10h19oF=Ac7oC+c3h6	5.00E+13	0.0	28800.0
3570.	Gc10h19oC=c2h5coc2h4+c5h10	5.00E+13	0.0	29400.0
3571.	Hc10h19oD=c4h8+c3h7coch2ch2	5.00E+13	0.0	28900.0
3572.	Ac10h19oB+o2=c10h19oBqjA	1.84E+45	-11.1	6538.0
3573.	Bc10h19oA+o2=c10h19oAqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
3574.	Bc10h19oC+o2=c10h19oCqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
3575.	Cc10h19oB+o2=c10h19oBqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
3576.	Cc10h19oD+o2=c10h19oDqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
3577.	Dc10h19oC+o2=c10h19oCqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
3578.	Dc10h19oE+o2=c10h19oEqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
3579.	Ec10h19oD+o2=c10h19oDqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
3580.	Fc10h19oE+o2=c10h19oEqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
3581.	Ac10h19oC+o2=c10h19oCqjA	1.84E+45	-11.1	6538.0
3582.	Cc10h19oA+o2=c10h19oAqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
3583.	Bc10h19oD+o2=c10h19oDqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
3584.	Dc10h19oB+o2=c10h19oBqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
3585.	Cc10h19oE+o2=c10h19oEqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
3586.	Ec10h19oC+o2=c10h19oCqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
3587.	Dc10h19oF+o2=c10h19oFqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
3588.	Fc10h19oD+o2=c10h19oDqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
3589.	Dc10h19oA+o2=c10h19oAqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
3590.	Ac10h19oD+o2=c10h19oDqjA	1.84E+45	-11.1	6538.0
3591.	Ec10h19oB+o2=c10h19oBqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
3592.	Bc10h19oE+o2=c10h19oEqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
3593.	Gc10h19oD+o2=c10h19oDqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
3594.	Fc10h19oC+o2=c10h19oCqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
3595.	Cc10h19oF+o2=c10h19oFqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
3596.	Ac10h19oE+o2=c10h19oEqjA	1.84E+45	-11.1	6538.0
3597.	Ec10h19oA+o2=c10h19oAqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
3598.	Fc10h19oB+o2=c10h19oBqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
3599.	Bc10h19oF+o2=c10h19oFqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
3600.	Gc10h19oC+o2=c10h19oCqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
3601.	Hc10h19oD+o2=c10h19oDqjH	1.84E+45	-11.1	6538.0
3602.	c10h19oBqjA=Cc10h18oBqA	5.75E+08	1.0	22000.0
3603.	c10h19oAqjB=Dc10h18oAqB	5.75E+08	1.0	25000.0
3604.	c10h19oAqjB=Ec10h18oAqB	9.89E+07	1.0	22000.0
3605.	c10h19oCqjB=Dc10h18oCqB	5.75E+08	1.0	22000.0
3606.	c10h19oBqjC=Ac10h18oBqC	8.62E+08	1.0	25000.0
3607.	c10h19oDqjC=Ec10h18oDqC	5.75E+08	1.0	22000.0
3608.	c10h19oCqjD=Bc10h18oCqD	5.75E+08	1.0	22000.0
3609.	c10h19oEqjD=Fc10h18oEqD	5.75E+08	1.0	22000.0
3610.	c10h19oDqjE=Cc10h18oDqE	5.75E+08	1.0	22000.0
3611.	c10h19oEqjF=Dc10h18oFqE	5.75E+08	1.0	22000.0
3612.	c10h19oCqjA=Dc10h18oCqA	9.89E+07	1.0	19000.0
3613.	c10h19oAqjC=Ec10h18oAqC	5.75E+08	1.0	25000.0
3614.	c10h19oAqjC=Fc10h18oAqC	9.89E+07	1.0	22000.0
3615.	c10h19oDqjB=Ec10h18oDqB	9.89E+07	1.0	19000.0
3616.	c10h19oBqjD=Ac10h18oBqD	1.48E+08	1.0	22000.0
3617.	c10h19oEqjC=Fc10h18oEqC	9.89E+07	1.0	19000.0
3618.	c10h19oCqjE=Bc10h18oCqE	9.89E+07	1.0	19000.0
3619.	c10h19oFqjD=Gc10h18oFqD	9.89E+07	1.0	19000.0
3620.	c10h19oDqjF=Cc10h18oDqF	9.89E+07	1.0	19000.0
3621.	c10h19oAqjD=Bc10h18oAqD	5.75E+08	1.0	22000.0
3622.	c10h19oDqjA=Cc10h18oDqA	5.75E+08	1.0	22000.0
3623.	c10h19oDqjA=Ec10h18oDqA	1.70E+07	1.0	18000.0
3624.	c10h19oBqjE=Cc10h18oBqE	5.75E+08	1.0	22000.0
3625.	c10h19oBqjE=Ac10h18oBqE	2.55E+07	1.0	21000.0
3626.	c10h19oEqjB=Dc10h18oEqB	5.75E+08	1.0	22000.0
3627.	c10h19oEqjB=Fc10h18oEqB	1.70E+07	1.0	18000.0
3628.	c10h19oDqjG=Ec10h18oDqG	5.75E+08	1.0	22000.0
3629.	c10h19oCqjF=Dc10h18oCqF	5.75E+08	1.0	22000.0
3630.	c10h19oFqjC=Ec10h18oFqC	5.75E+08	1.0	22000.0
3631.	c10h19oEqjA=Dc10h18oEqA	9.89E+07	1.0	19000.0
3632.	c10h19oAqjE=Bc10h18oAqE	9.89E+07	1.0	19000.0
3633.	c10h19oBqjF=Cc10h18oBqF	9.89E+07	1.0	19000.0
3634.	c10h19oFqjB=Ec10h18oFqB	9.89E+07	1.0	19000.0
3635.	c10h19oCqjG=Dc10h18oCqG	9.89E+07	1.0	19000.0
3636.	c10h19oDqjH=Ec10h18oDqH	9.89E+07	1.0	19000.0
3637.	Fc10h18oCqD=oh+c6h12+c2h5cohco	2.00E+13	0.0	28700.0
3638.	Ac10h18oDqC=oh+c2h4+c6h13cohco	2.00E+13	0.0	28700.0
3639.	Gc10h18oDqE=oh+c5h10+c3h7cohco	2.00E+13	0.0	28700.0
3640.	Bc10h18oEqD=oh+c3h6+c5h11cohco	2.00E+13	0.0	28700.0
3641.	Hc10h18oEqF=oh+c4h8+c4h9cohco	2.00E+13	0.0	28700.0
3642.	Cc10h18oBqA+o2=c10h18oBqAqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
3643.	Dc10h18oAqB+o2=c10h18oAqBqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
3644.	Ec10h18oAqB+o2=c10h18oAqBqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
3645.	Dc10h18oCqB+o2=c10h18oCqBqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
3646.	Ec10h18oCqB+o2=c10h18oCqBqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
3647.	Ac10h18oBqC+o2=c10h18oBqCqjA	1.84E+45	-11.1	6538.0
3648.	Ec10h18oDqC+o2=c10h18oDqCqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
3649.	Ac10h18oDqC+o2=c10h18oDqCqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
3650.	Fc10h18oDqC+o2=c10h18oDqCqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
3651.	Bc10h18oCqD+o2=c10h18oCqDqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
3652.	Ac10h18oCqD+o2=c10h18oCqDqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
3653.	Fc10h18oCqD+o2=c10h18oCqDqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
3654.	Gc10h18oCqD+o2=c10h18oCqDqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
3655.	Fc10h18oEqD+o2=c10h18oEqDqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
3656.	Ac10h18oEqD+o2=c10h18oEqDqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
3657.	Bc10h18oEqD+o2=c10h18oEqDqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

3658.	Gc10h18oEqD+o2=c10h18oEqDqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
3659.	Cc10h18oDqE+o2=c10h18oDqEqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
3660.	Bc10h18oDqE+o2=c10h18oDqEqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
3661.	Gc10h18oDqE+o2=c10h18oDqEqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
3662.	Hc10h18oDqE+o2=c10h18oDqEqjH	1.84E+45	-11.1	6538.0
3663.	Dc10h18oEqF+o2=c10h18oEqFqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
3664.	Cc10h18oEqF+o2=c10h18oEqFqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
3665.	Ic10h18oEqF+o2=c10h18oEqFqjI	1.84E+45	-11.1	6538.0
3666.	Hc10h18oEqF+o2=c10h18oEqFqjH	1.84E+45	-11.1	6538.0
3667.	Dc10h18oCqA+o2=c10h18oCqAqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
3668.	Ec10h18oAqC+o2=c10h18oAqCqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
3669.	Fc10h18oAqC+o2=c10h18oAqCqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
3670.	Ec10h18oDqB+o2=c10h18oDqBqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
3671.	Ac10h18oBqD+o2=c10h18oBqDqjA	1.84E+45	-11.1	6538.0
3672.	Fc10h18oEqC+o2=c10h18oEqCqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
3673.	Bc10h18oCqE+o2=c10h18oCqEqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
3674.	Gc10h18oFqD+o2=c10h18oFqDqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
3675.	Cc10h18oDqF+o2=c10h18oDqFqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
3676.	Bc10h18oAqD+o2=c10h18oAqDqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
3677.	Cc10h18oDqA+o2=c10h18oDqAqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
3678.	Ec10h18oDqA+o2=c10h18oDqAqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
3679.	Cc10h18oBqE+o2=c10h18oBqEqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
3680.	Ac10h18oBqE+o2=c10h18oBqEqjA	1.84E+45	-11.1	6538.0
3681.	Dc10h18oEqB+o2=c10h18oEqBqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
3682.	Fc10h18oEqB+o2=c10h18oEqBqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
3683.	Ec10h18oDqG+o2=c10h18oDqGqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
3684.	Dc10h18oCqF+o2=c10h18oCqFqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
3685.	Ec10h18oFqC+o2=c10h18oFqCqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
3686.	Dc10h18oEqA+o2=c10h18oEqAqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
3687.	Bc10h18oAqE+o2=c10h18oAqEqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
3688.	Cc10h18oBqF+o2=c10h18oBqFqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
3689.	Ec10h18oFqB+o2=c10h18oFqBqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
3690.	Dc10h18oCqG+o2=c10h18oCqGqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
3691.	Ec10h18oDqH+o2=c10h18oDqHqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
3692.	c10h18oBqAqjC=oh+c10h17oAoBqC	5.75E+08	1.0	26000.0
3693.	c10h18oAqBqjD=oh+c10h17oAoBqD	2.87E+08	1.0	20000.0
3694.	c10h18oAqBqjE=oh+c10h17oAoBqE	4.94E+07	1.0	17000.0
3695.	c10h18oCqBqjD=oh+c10h17oBoCqD	2.87E+08	1.0	20000.0
3696.	c10h18oCqBqjE=oh+c10h17oBoCqE	4.97E+07	1.0	20000.0
3697.	c10h18oBqCqjA=oh+c10h17oBoCqA	2.87E+08	1.0	20000.0
3698.	c10h18oDqCqjE=oh+c10h17oCoDqE	2.87E+08	1.0	20000.0
3699.	c10h18oDqCqjA=oh+c10h17oCoDqA	2.87E+08	1.0	20000.0
3700.	c10h18oDqCqjF=oh+c10h17oCoDqF	4.97E+07	1.0	20000.0
3701.	c10h18oCqDqjB=oh+c10h17oCoDqA	2.87E+08	1.0	20000.0
3702.	c10h18oCqDqjA=oh+c10h17oCoDqA	4.97E+07	1.0	20000.0
3703.	c10h18oCqDqjF=oh+c10h17oCoDqF	2.87E+08	1.0	20000.0
3704.	c10h18oCqDqjG=oh+c10h17oCoDqG	4.97E+07	1.0	20000.0
3705.	c10h18oEqDqjF=oh+c10h17oDoEqF	2.87E+08	1.0	20000.0
3706.	c10h18oEqDqjA=oh+c10h17oDoEqA	4.97E+07	1.0	20000.0
3707.	c10h18oEqDqjB=oh+c10h17oDoEqB	2.87E+08	1.0	20000.0
3708.	c10h18oEqDqjG=oh+c10h17oDoEqG	4.97E+07	1.0	20000.0
3709.	c10h18oDqEqjC=oh+c10h17oDoEqC	2.87E+08	1.0	20000.0
3710.	c10h18oDqEqjB=oh+c10h17oDoEqB	4.97E+07	1.0	20000.0
3711.	c10h18oDqEqjG=oh+c10h17oDoEqG	2.87E+08	1.0	20000.0
3712.	c10h18oDqEqjH=oh+c10h17oDoEqH	4.97E+07	1.0	20000.0
3713.	c10h18oEqFqjD=oh+c10h17oEoFqD	2.87E+08	1.0	20000.0
3714.	c10h18oEqFqjC=oh+c10h17oEoFqC	4.97E+07	1.0	20000.0
3715.	c10h18oEqFqjI=oh+c10h17oEoFqI	4.97E+07	1.0	20000.0
3716.	c10h18oEqFqjH=oh+c10h17oEoFqH	2.87E+08	1.0	20000.0
3717.	c10h18oCqAqjD=oh+c10h17oAoCqD	9.89E+07	1.0	23000.0
3718.	c10h18oAqCqjE=oh+c10h17oAoCqE	2.87E+08	1.0	23000.0
3719.	c10h18oAqCqjF=oh+c10h17oAoCqF	4.94E+07	1.0	20000.0
3720.	c10h18oDqBqjE=oh+c10h17oBoDqE	4.94E+07	1.0	20000.0
3721.	c10h18oBqDqjA=oh+c10h17oBoDqA	4.94E+07	1.0	20000.0
3722.	c10h18oEqCqjF=oh+c10h17oCoEqF	4.94E+07	1.0	20000.0
3723.	c10h18oCqEqjB=oh+c10h17oCoEqB	4.94E+07	1.0	20000.0
3724.	c10h18oFqDqjG=oh+c10h17oDoFqG	4.94E+07	1.0	20000.0
3725.	c10h18oDqFqjC=oh+c10h17oDoFqC	4.94E+07	1.0	20000.0
3726.	c10h18oAqDqjB=oh+c10h17oAoDqB	2.87E+08	1.0	23000.0
3727.	c10h18oDqAqjC=oh+c10h17oAoDqC	5.75E+08	1.0	26000.0
3728.	c10h18oDqAqjE=oh+c10h17oAoDqE	1.69E+07	1.0	22000.0
3729.	c10h18oBqEqjC=oh+c10h17oBoEqC	2.87E+08	1.0	23000.0
3730.	c10h18oBqEqjA=oh+c10h17oBoEqA	8.49E+06	1.0	19000.0
3731.	c10h18oEqBqjD=oh+c10h17oBoEqD	2.87E+08	1.0	23000.0
3732.	c10h18oEqBqjF=oh+c10h17oBoEqF	8.49E+06	1.0	19000.0
3733.	c10h18oDqGqjE=oh+c10h17oDoGqE	2.87E+08	1.0	23000.0
3734.	c10h18oCqFqjD=oh+c10h17oCoFqD	2.87E+08	1.0	23000.0
3735.	c10h18oFqCqjE=oh+c10h17oCoFqE	2.87E+08	1.0	23000.0
3736.	c10h18oEqAqjD=oh+c10h17oAoEqD	9.89E+07	1.0	23000.0
3737.	c10h18oAqEqjB=oh+c10h17oAoEqB	4.94E+07	1.0	20000.0
3738.	c10h18oBqFqjC=oh+c10h17oBoFqC	4.94E+07	1.0	20000.0
3739.	c10h18oFqBqjE=oh+c10h17oBoFqE	4.94E+07	1.0	20000.0
3740.	c10h18oCqGqjD=oh+c10h17oCoGqD	4.94E+07	1.0	20000.0
3741.	c10h18oDqHqjE=oh+c10h17oCoGqF	4.94E+07	1.0	20000.0
3742.	c10h17oAoBqC=oh+c7h15hco+choco	1.00E+16	0.0	43000.0
3743.	c10h17oAoBqD=oh+ch2co+hco+c6h13hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3744.	c10h17oAoBqE=oh+c2h4+choco+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3745.	c10h17oBoCqA=oh+ch2o+c9oyAoB	1.00E+16	0.0	43000.0
3746.	c10h17oBoCqD=oh+ch3coco+c6h13hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3747.	c10h17oBoCqE=oh+ch3co+ch2co+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3748.	c10h17oCoDqA=oh+ch2o+ch2co+c6h13co	1.00E+16	0.0	43000.0
3749.	c10h17oCoDqB=oh+ch3hco+c6h13coco	1.00E+16	0.0	43000.0
3750.	c10h17oCoDqE=oh+c2h5coco+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3751.	c10h17oCoDqF=oh+c2h5co+ch2co+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3752.	c10h17oCoDqG=oh+c2h5coco+c2h4+nc3h7hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3753.	c10h17oDoEqA=>oh+ch2o+c2h4+co+c5h11co	1.00E+16	0.0	43000.0
3754.	c10h17oDoEqB=>oh+ch3hco+ch2co+c5h11co	1.00E+16	0.0	43000.0
3755.	c10h17oDoEqC=oh+ethco+c5h11coco	1.00E+16	0.0	43000.0
3756.	c10h17oDoEqF=oh+nc4h9hco+c3h7coco	1.00E+16	0.0	43000.0
3757.	c10h17oDoEqG=>oh+ch2co+c3h7co+nc3h7hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3758.	c10h17oDoEqH=>oh+ethco+c2h4+c3h7coco	1.00E+16	0.0	43000.0
3759.	c10h17oEoFqC=>oh+ethco+ch2co+nc4h9co	1.00E+16	0.0	43000.0
3760.	c10h17oEoFqD=oh+nc3h7hco+c4h9coco	1.00E+16	0.0	43000.0
3761.	c10h17oEoFqH=>oh+ethco+ch2co+nc4h9co	1.00E+16	0.0	43000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

3762.	c10h17oEoFqI=>oh+ch3hco+c2h4+c4h9coco	1.00E+16	0.0	43000.0
3763.	c10h17oAoCqD=oh+hcoch2co+c6h13hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3764.	c10h17oAoCqE=oh+c5h11hco+ch2co+ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3765.	c10h17oAoCqF=oh+nc4h9hco+c2h4+hcoch2co	1.00E+16	0.0	43000.0
3766.	c10h17oBoDqA=oh+ch2o+c9oyAoC	1.00E+16	0.0	43000.0
3767.	c10h17oBoDqE=oh+c5h11hco+ch3coch2co	1.00E+16	0.0	43000.0
3768.	c10h17oCoEqB=oh+ch3hco+c8oyAoC	1.00E+16	0.0	43000.0
3769.	c10h17oCoEqF=oh+c2h5coch2co+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3770.	c10h17oDoFqC=oh+ethco+c4h9coch2co	1.00E+16	0.0	43000.0
3771.	c10h17oDoFqG=oh+nc3h7coch2co+nc3h7hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3772.	c10h17oAoDqB=oh+hco+c9oAoC	1.00E+16	0.0	43000.0
3773.	c10h17oAoDqC=oh+hcoch2hco+c6h13co	1.00E+16	0.0	43000.0
3774.	c10h17oAoDqE=oh+c5h11hco+choch2ch2co	1.00E+16	0.0	43000.0
3775.	c10h17oBoEqA=oh+ch2o+c9oyAoD	1.00E+16	0.0	43000.0
3776.	c10h17oBoEqC=oh+c8oAoC+ch3co	1.00E+16	0.0	43000.0
3777.	c10h17oBoEqD=oh+ch3coch2hco+c5h11co	1.00E+16	0.0	43000.0
3778.	c10h17oBoEqF=oh+c5oyAoD+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3779.	c10h17oDoGqE=oh+c3h7co+nc3h7coch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3780.	c10h17oDoGqE=oh+c3h7cohco+Ac5oB	1.00E+16	0.0	43000.0
3781.	c10h17oCoFqD=oh+pc4h9+ch2co+c2h5cohco	1.00E+16	0.0	43000.0
3782.	c10h17oCoFqD=oh+c4h9coch2hco+c2h5co	1.00E+16	0.0	43000.0
3783.	c10h17oCoFqE=oh+c4h9cohco+c2h5coch2	1.00E+16	0.0	43000.0
3784.	c10h17oCoFqE=oh+c2h5coch2hco+nc4h9co	1.00E+16	0.0	43000.0
3785.	c10h17oAoEqB=oh+hco+c9oAoD	1.00E+16	0.0	43000.0
3786.	c10h17oAoEqD=oh+c5h11co+choch2ch2cho	1.00E+16	0.0	43000.0
3787.	c10h17oBoFqC=oh+ch3co+c8oAoD	1.00E+16	0.0	43000.0
3788.	c10h17oBoFqE=oh+nc4h9co+c5oAoD	1.00E+16	0.0	43000.0
3789.	c10h17oCoGqD=oh+c2h5co+c3h7coc2h4hco	1.00E+16	0.0	43000.0
3790.	c10h17oCoGqF=oh+c3h7co+c6oAoD	1.00E+16	0.0	43000.0
3791.	c10h20-1+ho2=>oh+ch2o+c9h18	2.50E+12	1.0	25000.0
3792.	c10h20-2+ho2=>oh+ch3hco+c8h16	2.50E+12	1.0	25000.0
3793.	c10h20-2+ho2=>oh+c2h4+c7h15hco	2.50E+12	1.0	25000.0
3794.	c10h20-3+ho2=>oh+ethco+c7h14	2.50E+12	1.0	25000.0
3795.	c10h20-3+ho2=>oh+c3h6+c6h13hco	2.50E+12	1.0	25000.0
3796.	c10h20-4+ho2=>oh+nc3h7hco+c6h12	2.50E+12	1.0	25000.0
3797.	c10h20-4+ho2=>oh+c4h8+c5h11hco	2.50E+12	1.0	25000.0
3798.	c10h20-5+ho2=>oh+c5h10+nc4h9hco	5.00E+12	1.0	25000.0
3799.	c10h20-1+oh=ch2o+Ac9h19	1.40E+12	0.0	-900.0
3800.	c10h20-1+oh=ch3+c8h17hco	1.40E+12	0.0	-900.0
3801.	c10h20-2+oh=ch3hco+Ac8h17	1.40E+12	0.0	-900.0
3802.	c10h20-2+oh=c2h5+c7h15hco	1.40E+12	0.0	-900.0
3803.	c10h20-3+oh=ethco+Ac7h15	1.40E+12	0.0	-900.0
3804.	c10h20-3+oh=nc3h7+c6h13hco	1.40E+12	0.0	-900.0
3805.	c10h20-4+oh=nc3h7hco+Ac6h13	1.40E+12	0.0	-900.0
3806.	c10h20-4+oh=pc4h9+c5h11hco	1.40E+12	0.0	-900.0
3807.	c10h20-5+oh=Ac5h11+nc4h9hco	2.80E+12	0.0	-900.0
3808.	c10h20-1+O=ch2o+c9h18	3.40E+07	1.8	550.0
3809.	c10h20-2+O=ch3hco+c8h16	3.40E+07	1.8	550.0
3810.	c10h20-2+O=c2h4+c7h15hco	3.40E+07	1.8	550.0
3811.	c10h20-3+O=ethco+c7h14	3.40E+07	1.8	550.0
3812.	c10h20-3+O=c3h6+c6h13hco	3.40E+07	1.8	550.0
3813.	c10h20-4+O=nc3h7hco+c6h12	3.40E+07	1.8	550.0
3814.	c10h20-4+O=c4h8+c5h11hco	3.40E+07	1.8	550.0
3815.	c10h20-5+O=c5h10+nc4h9hco	6.80E+07	1.8	550.0
3816.	c10h20-1+ho2=oh+c10h20o-AB	1.00E+12	0.0	14400.0
3817.	c10h20-2+ho2=oh+c10h20o-BC	1.00E+12	0.0	14400.0
3818.	c10h20-3+ho2=oh+c10h20o-CD	1.00E+12	0.0	14400.0
3819.	c10h20-4+ho2=oh+c10h20o-DE	1.00E+12	0.0	14400.0
3820.	c10h20-5+ho2=oh+c10h20o-EF	1.00E+12	0.0	14400.0
3821.	c10h20-1+H=H2+Cc10h19-1	1.70E+05	2.5	2490.0
3822.	c10h20-1+oh=h2o+Cc10h19-1	3.10E+06	2.0	-300.0
3823.	c10h20-1+ho2=h2o2+Cc10h19-1	9.60E+03	2.6	13900.0
3824.	c10h20-1+ch3=ch4+Cc10h19-1	2.20E+00	3.5	5675.0
3825.	c10h20-1+ch3o2=ch3o2h+Cc10h19-1	2.20E+00	3.5	5675.0
3826.	c10h20-1+c2h5=c2h6+Cc10h19-1	2.20E+00	3.5	6835.0
3827.	c10h20-1+O=oh+Cc10h19-1	6.00E+10	0.7	7682.0
3828.	c10h20-2+H=H2+Cc10h19-1	1.70E+05	2.5	2490.0
3829.	c10h20-2+oh=h2o+Cc10h19-1	3.10E+06	2.0	-300.0
3830.	c10h20-2+ho2=h2o2+Cc10h19-1	9.60E+03	2.6	13900.0
3831.	c10h20-2+ch3=ch4+Cc10h19-1	2.20E+00	3.5	5675.0
3832.	c10h20-2+ch3o2=ch3o2h+Cc10h19-1	2.20E+00	3.5	5675.0
3833.	c10h20-2+c2h5=c2h6+Cc10h19-1	2.20E+00	3.5	6835.0
3834.	c10h20-2+O=oh+Cc10h19-1	6.00E+10	0.7	7682.0
3835.	c10h20-2+H=H2+Dc10h19-2	1.70E+05	2.5	2490.0
3836.	c10h20-2+oh=h2o+Dc10h19-2	3.10E+06	2.0	-300.0
3837.	c10h20-2+ho2=h2o2+Dc10h19-2	9.60E+03	2.6	13900.0
3838.	c10h20-2+ch3=ch4+Dc10h19-2	2.20E+00	3.5	5675.0
3839.	c10h20-2+ch3o2=ch3o2h+Dc10h19-2	2.20E+00	3.5	5675.0
3840.	c10h20-2+c2h5=c2h6+Dc10h19-2	2.20E+00	3.5	6835.0
3841.	c10h20-2+O=oh+Dc10h19-2	6.00E+10	0.7	7682.0
3842.	c10h20-3+H=H2+Dc10h19-2	1.70E+05	2.5	2490.0
3843.	c10h20-3+oh=h2o+Dc10h19-2	3.10E+06	2.0	-300.0
3844.	c10h20-3+ho2=h2o2+Dc10h19-2	9.60E+03	2.6	13900.0
3845.	c10h20-3+ch3=ch4+Dc10h19-2	2.20E+00	3.5	5675.0
3846.	c10h20-3+ch3o2=ch3o2h+Dc10h19-2	2.20E+00	3.5	5675.0
3847.	c10h20-3+c2h5=c2h6+Dc10h19-2	2.20E+00	3.5	6835.0
3848.	c10h20-3+O=oh+Dc10h19-2	6.00E+10	0.7	7682.0
3849.	c10h20-3+H=H2+Ec10h19-3	1.70E+05	2.5	2490.0
3850.	c10h20-3+oh=h2o+Ec10h19-3	3.10E+06	2.0	-300.0
3851.	c10h20-3+ho2=h2o2+Ec10h19-3	9.60E+03	2.6	13900.0
3852.	c10h20-3+ch3=ch4+Ec10h19-3	2.20E+00	3.5	5675.0
3853.	c10h20-3+ch3o2=ch3o2h+Ec10h19-3	2.20E+00	3.5	5675.0
3854.	c10h20-3+c2h5=c2h6+Ec10h19-3	2.20E+00	3.5	6835.0
3855.	c10h20-3+O=oh+Ec10h19-3	6.00E+10	0.7	7682.0
3856.	c10h20-4+H=H2+Ec10h19-3	1.70E+05	2.5	2490.0
3857.	c10h20-4+oh=h2o+Ec10h19-3	3.10E+06	2.0	-300.0
3858.	c10h20-4+ho2=h2o2+Ec10h19-3	9.60E+03	2.6	13900.0
3859.	c10h20-4+ch3=ch4+Ec10h19-3	2.20E+00	3.5	5675.0
3860.	c10h20-4+ch3o2=ch3o2h+Ec10h19-3	2.20E+00	3.5	5675.0
3861.	c10h20-4+c2h5=c2h6+Ec10h19-3	2.20E+00	3.5	6835.0
3862.	c10h20-4+O=oh+Ec10h19-3	6.00E+10	0.7	7682.0
3863.	c10h20-4+H=H2+Fc10h19-4	1.70E+05	2.5	2490.0
3864.	c10h20-4+oh=h2o+Fc10h19-4	3.10E+06	2.0	-300.0
3865.	c10h20-4+ho2=h2o2+Fc10h19-4	9.60E+03	2.6	13900.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

3866.	c10h20-4+ch3=ch4+Fc10h19-4	2.20E+00	3.5	5675.0
3867.	c10h20-4+ch3o2=ch3o2h+Fc10h19-4	2.20E+00	3.5	5675.0
3868.	c10h20-4+c2h5=c2h6+Fc10h19-4	2.20E+00	3.5	6835.0
3869.	c10h20-4+O=oh+Fc10h19-4	6.00E+10	0.7	7682.0
3870.	c10h20-5+H=H2+Fc10h19-4	3.40E+05	2.5	2490.0
3871.	c10h20-5+oh=h2o+Fc10h19-4	6.20E+06	2.0	-300.0
3872.	c10h20-5+ho2=h2o2+Fc10h19-4	1.92E+04	2.6	13900.0
3873.	c10h20-5+ch3=ch4+Fc10h19-4	4.40E+00	3.5	5675.0
3874.	c10h20-5+ch3o2=ch3o2h+Fc10h19-4	4.40E+00	3.5	5675.0
3875.	c10h20-5+c2h5=c2h6+Fc10h19-4	4.40E+00	3.5	6835.0
3876.	c10h20-5+O=oh+Fc10h19-4	1.20E+11	0.7	7682.0
3877.	Cc10h19-1=c4h6+Ac6h13	2.50E+13	0.0	35000.0
3878.	Dc10h19-2=c5h8-13+Ac5h11	2.50E+13	0.0	35000.0
3879.	Ec10h19-3=c6h10-13+pc4h9	2.50E+13	0.0	35000.0
3880.	Fc10h19-4=c7h12-13+nc3h7	2.50E+13	0.0	35000.0
3881.	c9h19hco+H=H2+c9h19co	4.00E+13	0.0	4200.0
3882.	c9h19hco+oh=h2o+c9h19co	4.20E+12	0.0	500.0
3883.	c9h19hco+ho2=h2o2+c9h19co	1.00E+12	0.0	10000.0
3884.	c9h19hco+ch3=ch4+c9h19co	2.00E-06	5.6	2500.0
3885.	c9h19hco+c2h5=c2h6+c9h19co	1.30E+12	0.0	8500.0
3886.	c9h19hco+o2=ho2+c9h19co	1.00E+13	0.0	40700.0
3887.	c9h19co=>co+Ac9h19	2.00E+13	0.0	28700.0
3888.	c9h19co+ho2=>co2+oh+Ac9h19	2.00E+13	0.0	0.0
3889.	c10h20oB+H=>H2+ch2co+Ac8h17	2.70E+07	2.0	5000.0
3890.	c10h20oB+oh=>h2o+ch2co+Ac8h17	7.80E+06	2.0	-765.0
3891.	c10h20oB+ho2=>h2o2+ch2co+Ac8h17	1.20E+12	0.0	15500.0
3892.	c10h20oB+ch3=>ch4+ch2co+Ac8h17	6.00E+11	0.0	9600.0
3893.	c10h20oB+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+Ac8h17	6.00E+11	0.0	9600.0
3894.	c10h20oB+c2h5=>c2h6+ch2co+Ac8h17	6.00E+11	0.0	11000.0
3895.	c10h20oB+H=>H2+MVK+Ac6h13	2.70E+07	2.0	5000.0
3896.	c10h20oB+oh=>h2o+MVK+Ac6h13	7.80E+06	2.0	-765.0
3897.	c10h20oB+ho2=>h2o2+MVK+Ac6h13	1.20E+12	0.0	15500.0
3898.	c10h20oB+ch3=>ch4+MVK+Ac6h13	6.00E+11	0.0	9600.0
3899.	c10h20oB+ch3o2=>ch3o2h+MVK+Ac6h13	6.00E+11	0.0	9600.0
3900.	c10h20oB+c2h5=>c2h6+MVK+Ac6h13	6.00E+11	0.0	11000.0
3901.	c10h20oC+H=H2+Bc10h19oC	2.70E+07	2.0	5000.0
3902.	c10h20oC+oh=h2o+Bc10h19oC	7.80E+06	2.0	-765.0
3903.	c10h20oC+ho2=h2o2+Bc10h19oC	1.20E+12	0.0	15500.0
3904.	c10h20oC+ch3=ch4+Bc10h19oC	6.00E+11	0.0	9600.0
3905.	c10h20oC+ch3o2=ch3o2h+Bc10h19oC	6.00E+11	0.0	9600.0
3906.	c10h20oC+c2h5=c2h6+Bc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
3907.	c10h20oC+H=H2+Dc10h19oC	2.70E+07	2.0	5000.0
3908.	c10h20oC+oh=h2o+Dc10h19oC	7.80E+06	2.0	-765.0
3909.	c10h20oC+ho2=h2o2+Dc10h19oC	1.20E+12	0.0	15500.0
3910.	c10h20oC+ch3=ch4+Dc10h19oC	6.00E+11	0.0	9600.0
3911.	c10h20oC+ch3o2=ch3o2h+Dc10h19oC	6.00E+11	0.0	9600.0
3912.	c10h20oC+c2h5=c2h6+Dc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
3913.	c10h20oD+H=H2+Cc10h19oD	2.70E+07	2.0	5000.0
3914.	c10h20oD+oh=h2o+Cc10h19oD	7.80E+06	2.0	-765.0
3915.	c10h20oD+ho2=h2o2+Cc10h19oD	1.20E+12	0.0	15500.0
3916.	c10h20oD+ch3=ch4+Cc10h19oD	6.00E+11	0.0	9600.0
3917.	c10h20oD+ch3o2=ch3o2h+Cc10h19oD	6.00E+11	0.0	9600.0
3918.	c10h20oD+c2h5=c2h6+Cc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
3919.	c10h20oD+H=H2+Ec10h19oD	2.70E+07	2.0	5000.0
3920.	c10h20oD+oh=h2o+Ec10h19oD	7.80E+06	2.0	-765.0
3921.	c10h20oD+ho2=h2o2+Ec10h19oD	1.20E+12	0.0	15500.0
3922.	c10h20oD+ch3=ch4+Ec10h19oD	6.00E+11	0.0	9600.0
3923.	c10h20oD+ch3o2=ch3o2h+Ec10h19oD	6.00E+11	0.0	9600.0
3924.	c10h20oD+c2h5=c2h6+Ec10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
3925.	c10h20oE+H=H2+Dc10h19oE	2.70E+07	2.0	5000.0
3926.	c10h20oE+oh=h2o+Dc10h19oE	7.80E+06	2.0	-765.0
3927.	c10h20oE+ho2=h2o2+Dc10h19oE	1.20E+12	0.0	15500.0
3928.	c10h20oE+ch3=ch4+Dc10h19oE	6.00E+11	0.0	9600.0
3929.	c10h20oE+ch3o2=ch3o2h+Dc10h19oE	6.00E+11	0.0	9600.0
3930.	c10h20oE+c2h5=c2h6+Dc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
3931.	c10h20oE+H=H2+Fc10h19oE	2.70E+07	2.0	5000.0
3932.	c10h20oE+oh=h2o+Fc10h19oE	7.80E+06	2.0	-765.0
3933.	c10h20oE+ho2=h2o2+Fc10h19oE	1.20E+12	0.0	15500.0
3934.	c10h20oE+ch3=ch4+Fc10h19oE	6.00E+11	0.0	9600.0
3935.	c10h20oE+ch3o2=ch3o2h+Fc10h19oE	6.00E+11	0.0	9600.0
3936.	c10h20oE+c2h5=c2h6+Fc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
3937.	c2h5cohco+oh=>h2o+c2h5coco	4.20E+12	0.0	500.0
3938.	c2h5cohco+H=>H2+c2h5coco	4.00E+13	0.0	4200.0
3939.	c2h5cohco+ho2=>h2o2+c2h5coco	1.00E+12	0.0	10000.0
3940.	c2h5coco=>co+c2h5co	2.00E+13	0.0	28700.0
3941.	c2h5coco+ho2=>oh+co2+c2h5co	2.00E+13	0.0	0.0
3942.	ch3coch2hco+oh=>h2o+ch3coch2co	4.20E+12	0.0	500.0
3943.	ch3coch2hco+H=>H2+ch3coch2co	4.00E+13	0.0	4200.0
3944.	ch3coch2hco+ho2=>h2o2+ch3coch2co	1.00E+12	0.0	10000.0
3945.	ch3coch2co=>co+ch2coch3	2.00E+13	0.0	28700.0
3946.	ch3coch2co+ho2=>oh+co2+ch2coch3	2.00E+13	0.0	0.0
3947.	choch2ch2cho+oh=>h2o+choch2ch2co	8.40E+12	0.0	500.0
3948.	choch2ch2cho+H=>H2+choch2ch2co	8.00E+13	0.0	4200.0
3949.	choch2ch2cho+ho2=>h2o2+choch2ch2co	2.00E+12	0.0	10000.0
3950.	choch2ch2co=>co+ch2ch2hco	2.00E+13	0.0	28700.0
3951.	choch2ch2co+ho2=oh+co2+ch2ch2hco	2.00E+13	0.0	0.0
3952.	c3h7cohco+oh=>h2o+c3h7coco	4.20E+12	0.0	500.0
3953.	c3h7cohco+H=>H2+c3h7coco	4.00E+13	0.0	4200.0
3954.	c3h7cohco+ho2=>h2o2+c3h7coco	1.00E+12	0.0	10000.0
3955.	c3h7coco=>co+c3h7co	2.00E+13	0.0	28700.0
3956.	c3h7coco+ho2=>oh+co2+c3h7co	2.00E+13	0.0	0.0
3957.	c2h5coch2hco+oh=h2o+c2h5coch2co	4.20E+12	0.0	500.0
3958.	c2h5coch2hco+H=H2+c2h5coch2co	4.00E+13	0.0	4200.0
3959.	c2h5coch2hco+ho2=h2o2+c2h5coch2co	1.00E+12	0.0	10000.0
3960.	c2h5coch2co=co+c2h5coch2	2.00E+13	0.0	28700.0
3961.	c2h5coch2co+ho2=>oh+co2+c2h5coch2	2.00E+13	0.0	0.0
3962.	c5oAoD+oh=>h2o+c5oyAoD	4.20E+12	0.0	500.0
3963.	c5oAoD+H=>H2+c5oyAoD	4.00E+13	0.0	4200.0
3964.	c5oAoD+ho2=>h2o2+c5oyAoD	1.00E+12	0.0	10000.0
3965.	c5oyAoD=>co+ch3coc2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
3966.	c5oyAoD+ho2=>oh+co2+ch3coc2h4	2.00E+13	0.0	0.0
3967.	c5oAoE+oh=>h2o+c5oyAoE	8.40E+12	0.0	500.0
3968.	c5oAoE+H=>H2+c5oyAoE	8.00E+13	0.0	4200.0
3969.	c5oAoE+ho2=>h2o2+c5oyAoE	2.00E+12	0.0	10000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

3970.	c5oyAoE=>co+ch2ch2ch2hco	2.00E+13	0.0	28700.0
3971.	c5oyAoE+ho2=>oh+co2+ch2ch2ch2hco	2.00E+13	0.0	0.0
3972.	c4h9cohco+oh=h2o+c4h9coco	4.20E+12	0.0	500.0
3973.	c4h9cohco+H=H2+c4h9coco	4.00E+13	0.0	4200.0
3974.	c4h9cohco+ho2=h2o2+c4h9coco	1.00E+12	0.0	10000.0
3975.	c4h9coco=>co+nc4h9co	2.00E+13	0.0	28700.0
3976.	c4h9coco+ho2=>oh+co2+nc4h9co	2.00E+13	0.0	0.0
3977.	nc3h7coch2hco+oh=>h2o+nc3h7coch2co	4.20E+12	0.0	500.0
3978.	nc3h7coch2hco+H=>H2+nc3h7coch2co	4.00E+13	0.0	4200.0
3979.	nc3h7coch2hco+ho2=>h2o2+nc3h7coch2co	1.00E+12	0.0	10000.0
3980.	nc3h7coch2co=>co+Ac5oB	2.00E+13	0.0	28700.0
3981.	nc3h7coch2co+ho2=>oh+co2+Ac5oB	2.00E+13	0.0	0.0
3982.	c6oAoD+oh=>h2o+c6oyAoD	4.20E+12	0.0	500.0
3983.	c6oAoD+H=>H2+c6oyAoD	4.00E+13	0.0	4200.0
3984.	c6oAoD+ho2=>h2o2+c6oyAoD	1.00E+12	0.0	10000.0
3985.	c6oyAoD=>co+c2h5coc2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
3986.	c6oyAoD+ho2=>oh+co2+c2h5coc2h4	2.00E+13	0.0	0.0
3987.	c6oAoE+oh=>h2o+c6oyAoE	4.20E+12	0.0	500.0
3988.	c6oAoE+H=>H2+c6oyAoE	4.00E+13	0.0	4200.0
3989.	c6oAoE+ho2=>h2o2+c6oyAoE	1.00E+12	0.0	10000.0
3990.	c6oyAoE=>co+Ec5oB	2.00E+13	0.0	28700.0
3991.	c6oyAoE+ho2=>oh+co2+Ec5oB	2.00E+13	0.0	0.0
3992.	c5h11cohco+oh=>h2o+c5h11coco	4.20E+12	0.0	500.0
3993.	c5h11cohco+H=>H2+c5h11coco	4.00E+13	0.0	4200.0
3994.	c5h11cohco+ho2=>h2o2+c5h11coco	1.00E+12	0.0	10000.0
3995.	c5h11coco=>co+c5h11co	2.00E+13	0.0	28700.0
3996.	c5h11coco+ho2=>oh+co2+c5h11co	2.00E+13	0.0	0.0
3997.	c4h9coch2hco+oh=>h2o+c4h9coch2co	4.20E+12	0.0	500.0
3998.	c4h9coch2hco+H=>H2+c4h9coch2co	4.00E+13	0.0	4200.0
3999.	c4h9coch2hco+ho2=>h2o2+c4h9coch2co	1.00E+12	0.0	10000.0
4000.	c4h9coch2co=>co+pc4h9+ch2co	2.00E+13	0.0	28700.0
4001.	c4h9coch2co+ho2=>oh+co2+pc4h9+ch2co	2.00E+13	0.0	0.0
4002.	c3h7coc2h4hco+oh=>h2o+c3h7coc2h4co	4.20E+12	0.0	500.0
4003.	c3h7coc2h4hco+H=>H2+c3h7coc2h4co	4.00E+13	0.0	4200.0
4004.	c3h7coc2h4hco+ho2=>h2o2+c3h7coc2h4co	1.00E+12	0.0	10000.0
4005.	c3h7coc2h4co=>co+c3h7coch2ch2	2.00E+13	0.0	28700.0
4006.	c3h7coc2h4co+ho2=>oh+co2+c3h7coch2ch2	2.00E+13	0.0	0.0
4007.	c7oAoE+oh=>h2o+c7oyAoE	4.20E+12	0.0	500.0
4008.	c7oAoE+H=>H2+c7oyAoE	4.00E+13	0.0	4200.0
4009.	c7oAoE+ho2=>h2o2+c7oyAoE	1.00E+12	0.0	10000.0
4010.	c7oyAoE=>co+Fc6oC	2.00E+13	0.0	28700.0
4011.	c7oyAoE+ho2=>oh+co2+Fc6oC	2.00E+13	0.0	0.0
4012.	c6h13cohco+oh=>h2o+c6h13coco	4.20E+12	0.0	500.0
4013.	c6h13cohco+H=>H2+c6h13coco	4.00E+13	0.0	4200.0
4014.	c6h13cohco+ho2=>h2o2+c6h13coco	1.00E+12	0.0	10000.0
4015.	c6h13coco=>co+c6h13co	2.00E+13	0.0	28700.0
4016.	c6h13coco+ho2=>oh+co2+c6h13co	2.00E+13	0.0	0.0
4017.	c8oAoC+oh=>h2o+c8oyAoC	4.20E+12	0.0	500.0
4018.	c8oAoC+H=>H2+c8oyAoC	4.00E+13	0.0	4200.0
4019.	c8oAoC+ho2=>h2o2+c8oyAoC	1.00E+12	0.0	10000.0
4020.	c8oyAoC=>co+ch2co+Ac5h11	2.00E+13	0.0	28700.0
4021.	c8oyAoC+ho2=>oh+co2+ch2co+Ac5h11	2.00E+13	0.0	0.0
4022.	c8oAoD+oh=>h2o+c8oyAoD	4.20E+12	0.0	500.0
4023.	c8oAoD+H=>H2+c8oyAoD	4.00E+13	0.0	4200.0
4024.	c8oAoD+ho2=>h2o2+c8oyAoD	1.00E+12	0.0	10000.0
4025.	c8oyAoD=>co+Ac7oC	2.00E+13	0.0	28700.0
4026.	c8oyAoD+ho2=>oh+co2+Ac7oC	2.00E+13	0.0	0.0
4027.	c8oAoE+oh=>h2o+c8oyAoE	4.20E+12	0.0	500.0
4028.	c8oAoE+H=>H2+c8oyAoE	4.00E+13	0.0	4200.0
4029.	c8oAoE+ho2=>h2o2+c8oyAoE	1.00E+12	0.0	10000.0
4030.	c8oyAoE=>co+Ac7oD	2.00E+13	0.0	28700.0
4031.	c8oyAoE+ho2=>oh+co2+Ac7oD	2.00E+13	0.0	0.0
4032.	c9oAoB+oh=>h2o+c9oyAoB	4.20E+12	0.0	500.0
4033.	c9oAoB+H=>H2+c9oyAoB	4.00E+13	0.0	4200.0
4034.	c9oAoB+ho2=>h2o2+c9oyAoB	1.00E+12	0.0	10000.0
4035.	c9oyAoB=>co+c7h15co	2.00E+13	0.0	28700.0
4036.	c9oyAoB+ho2=>oh+co2+c7h15co	2.00E+13	0.0	0.0
4037.	c9oAoC+oh=>h2o+c9oyAoC	4.20E+12	0.0	500.0
4038.	c9oAoC+H=>H2+c9oyAoC	4.00E+13	0.0	4200.0
4039.	c9oAoC+ho2=>h2o2+c9oyAoC	1.00E+12	0.0	10000.0
4040.	c9oyAoC=>co+Ac8oB	2.00E+13	0.0	28700.0
4041.	c9oyAoC+ho2=>oh+co2+Ac8oB	2.00E+13	0.0	0.0
4042.	c9oAoD+oh=>h2o+c9oyAoD	4.20E+12	0.0	500.0
4043.	c9oAoD+H=>H2+c9oyAoD	4.00E+13	0.0	4200.0
4044.	c9oAoD+ho2=>h2o2+c9oyAoD	1.00E+12	0.0	10000.0
4045.	c9oyAoD=>co+c5h11coc2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
4046.	c9oyAoD+ho2=>oh+co2+c5h11coc2h4	2.00E+13	0.0	0.0
4047.	c9oAoE+oh=>h2o+c9oyAoE	4.20E+12	0.0	500.0
4048.	c9oAoE+H=>H2+c9oyAoE	4.00E+13	0.0	4200.0
4049.	c9oAoE+ho2=>h2o2+c9oyAoE	1.00E+12	0.0	10000.0
4050.	c9oyAoE=>co+c2h4+ch2co+pc4h9	2.00E+13	0.0	28700.0
4051.	c9oyAoE+ho2=>oh+co2+c2h4+ch2co+pc4h9	2.00E+13	0.0	0.0
4052.	Fc6oC+o2=c6oCqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
4053.	c6oCqjF=Dc6oCqF	5.75E+08	1.0	22700.0
4054.	Dc6oCqF+o2=c6oCqFqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
4055.	c6oCqFqjD=>2oh+hcoch2hco+c2h5co	1.00E+16	0.0	43000.0
4056.	c3h7coch2ch2+o2=c3h7coc2h4qj	1.84E+45	-11.1	6538.0
4057.	c3h7coc2h4qj=c2h5chcoc2h4q	9.90E+07	1.0	19700.0
4058.	c3h7coc2h4qj=c3h7cochch2q	3.34E+09	1.0	30200.0
4059.	c2h5chcoc2h4q+o2=c2h5chqjcoc2h4q	1.84E+45	-11.1	6538.0
4060.	c2h5chqjcoc2h4q=>2oh+ethco+hcoch2co	1.00E+16	0.0	43000.0
4061.	c3h7cochch2q+o2=c3h7cochqjch2q	1.84E+45	-11.1	6538.0
4062.	c3h7cochqjch2q=>2oh+hco+c3h7cohco	1.00E+16	0.0	43000.0
4063.	c3h7cochqjch2q=>2oh+chocho+c3h7co	1.00E+16	0.0	43000.0
4064.	Ac7oC+o2=c7oCqjA	1.84E+45	-11.1	6538.0
4065.	c7oCqjA=Dc7oCqA	9.90E+07	1.0	19705.0
4066.	Dc7oCqA+o2=c7oCqAqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
4067.	c7oCqAqjD=>2oh+nc3h7hco+hcoch2co	1.00E+16	0.0	43000.0
4068.	Ac7oC=c2h4+nc4h9co	2.00E+13	0.0	23300.0
4069.	Ac7oD+o2=c7oDqjA	1.84E+45	-11.1	6538.0
4070.	c7oDqjA=Cc7oDqA	5.75E+08	1.0	22700.0
4071.	Cc7oDqA+o2=c7oDqAqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
4072.	c7oDqAqjC=>2oh+hcoch2hco+c3h7co	1.00E+16	0.0	43000.0
4073.	Ac8oB+o2=c8oBqjA	1.84E+45	-11.1	6538.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

4074.	c8oBqjA=Cc8oBqA	5.75E+08	1.0	22700.0
4075.	Cc8oBqA+o2=c8oBqAqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
4076.	c8oBqAqjC=>2oh+choco+c5h11hco	1.00E+11	0.0	43000.0
4077.	c5h11coc2h4+o2=c5h11coc2h4qj	1.84E+45	-11.1	6538.0
4078.	c5h11coc2h4qj=c4h9chcoc2h4q	9.90E+07	1.0	19700.0
4079.	c4h9chcoc2h4q+o2=c4h9chqjcoc2h4q	1.84E+45	-11.1	6538.0
4080.	c4h9chqjcoc2h4q=>2oh+nc4h9hco+hcoch2co	1.00E+16	0.0	43000.0
4081.	Ac9oB+o2=c9oBqjA	1.84E+45	-11.1	6538.0
4082.	c9oBqjA=Cc9oBqA	5.75E+08	1.0	22700.0
4083.	Cc9oBqA+o2=c9oBqAqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
4084.	c9oBqAqjC=>2oh+choco+c6h13hco	1.00E+16	0.0	43000.0
4085.	Ac9oC+o2=c9oCqjA	1.84E+45	-11.1	6538.0
4086.	c9oCqjA=Dc9oCqA	9.90E+07	1.0	19700.0
4087.	Dc9oCqA+o2=c9oCqAqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
4088.	c9oCqAqjD=>2oh+hcoch2co+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
4089.	c4h6+c2h3=c6h9	2.00E+11	0.0	5000.0
4090.	c4h6+c2h3=CHD13+H	7.00E+11	0.0	1650.0
4091.	Fc6h9-13=cyc6h9	1.00E+08	0.9	5900.0
4092.	c6h9=chxe1rD	1.00E+08	0.9	5900.0
4093.	cyc6h9+ho2=CHD13+h2o2	1.00E+12	0.0	0.0
4094.	cyc6h9+oh=CHD13+h2o	1.80E+13	0.0	0.0
4095.	cyc6h9+o2=ho2+CHD13	9.60E+12	0.0	15160.0
4096.	cyc6h9=H+CHD13	3.00E+13	0.0	50500.0
4097.	cyc6h9+O=CHD13+oh	1.80E+13	0.0	0.0
4098.	cyc6h9+H=CHD13+H2	3.16E+13	0.0	0.0
4099.	cyc6h9+ch3=CHD13+ch4	8.00E+12	0.0	0.0
4100.	cyc6h9+c2h3=CHD13+c2h4	4.00E+12	0.0	0.0
4101.	cyc6h9+c2h5=CHD13+c2h6	4.00E+12	0.0	0.0
4102.	cyc6h9+ac3h5=CHD13+c3h6	4.00E+12	0.0	0.0
4103.	cyc6h9+sc3h5=CHD13+c3h6	4.00E+12	0.0	0.0
4104.	cyc6h9+tc3h5=CHD13+c3h6	4.00E+12	0.0	0.0
4105.	cyc6h9+hco=CHD13+ch2o	4.00E+12	0.0	0.0
4106.	cyc6h9+ch3o=CHD13+ch3oh	4.00E+12	0.0	0.0
4107.	cyc6h9+ho2=cyc6h9o+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
4108.	cyc6h9+ho2=>cyc5h8+hco+oh	4.50E+12	0.0	0.0
4109.	cyc6h9+O=cyc5h8+hco	8.26E+13	0.0	0.0
4110.	cyc6h9+o2=acrol+c2h4+hco	3.01E+10	0.0	2870.0
4111.	cyc6h9+o2=ac3h5co+c2h4o	1.31E+10	0.0	0.0
4112.	cyc6h9+o2=chxe1qjC	2.43E+39	-9.0	8620.0
4113.	chxe1qjC=Echxe1qC	2.14E+09	1.0	28226.6
4114.	Echxe1qC+o2=chxe1qCqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
4115.	chxe1qCqjE=chxe1oCqE+oh	1.07E+09	1.0	26226.6
4116.	oh+chxe1oCojE=chxe1oCqE	1.81E+13	0.0	0.0
4117.	Dc6e5oAoC=chxe1oCojE	1.00E+08	0.9	5900.0
4118.	Fc6e3oAoE=chxe1oCojE	1.00E+08	0.9	5900.0
4119.	Dc6e5oAoC+O=acrol+hcoch2co	2.00E+14	0.0	0.0
4120.	Dc6e5oAoC+ho2=oh+acrol+hcoch2co	1.00E+13	0.0	0.0
4121.	ch2co+ac3h4hco1=Fc6e3oAoE	2.00E+11	0.0	2010.0
4122.	chxe1rD=cyc6h9	1.30E+13	0.0	44500.0
4123.	chxe1rD=Ac6h9-15	2.00E+13	0.0	35500.0
4124.	chxe1rD+o2=ho2+CHD13	9.60E+12	0.0	2500.0
4125.	chxe1rD=H+CHD13	3.20E+13	0.0	34500.0
4126.	chxe1rD+o2=ho2+CHD14	9.60E+12	0.0	5000.0
4127.	chxe1rD=H+CHD14	3.00E+13	0.0	33800.0
4128.	Fc6e5oA=cyc6h9o	1.00E+08	0.9	5900.0
4129.	c2h2+ch2ch2ch2hco=Fc6e5oA	7.77E+06	1.4	7755.0
4130.	Fc6e2oA=cyc6h9o	1.00E+08	0.9	5900.0
4131.	c2h4+sc3h5co=Fc6e2oA	1.32E+04	2.5	6130.0
4132.	sc3h5co=sc3h5+co	8.60E+15	0.0	23000.0
4133.	Fc6h9-13+o2=hex135+ho2	2.70E+11	0.0	2500.0
4134.	Fc6h9-13=hex135+H	3.20E+13	0.0	34800.0
4135.	Fc6h9-13=nc4h5+c2h4	2.00E+13	0.0	35500.0
4136.	Fc6h9-13+H=c6h10-13	1.00E+14	0.0	0.0
4137.	c6h9=H+hex135	3.20E+13	0.0	40700.0
4138.	c6h9+o2=ho2+hex135	1.60E+12	0.0	15160.0
4139.	Ac6h9-15=c6h9	6.00E+08	1.0	12400.0
4140.	Ac6h9-15=c2h2+Dc4h7-1	2.00E+13	0.0	33000.0
4141.	Ac6h9-15+o2=Dc4h7-1+co+ch2o	4.50E+16	-1.4	1000.0
4142.	Ac6h9-15+H=c6h10-15	1.00E+14	0.0	0.0
4143.	hex135=CHD13	4.50E+12	0.0	43300.0
4144.	CHD13=c6h6+H2	5.00E+14	0.0	65140.0
4145.	CHD13=c6h7C+H	5.01E+15	0.0	72598.0
4146.	CHD13+o2=c6h7C+ho2	8.31E+11	0.0	24858.0
4147.	CHD13+ho2=c6h7C+h2o2	4.00E+12	0.0	17057.0
4148.	CHD13+oh=c6h7C+h2o	5.60E+12	0.0	861.0
4149.	CHD13+O=c6h7C+oh	1.40E+13	0.0	-795.0
4150.	CHD13+H=c6h7C+H2	1.30E+13	0.0	4445.0
4151.	CHD13+ch3=c6h7C+ch4	1.23E+11	0.0	5201.0
4152.	CHD13+c2h5=c6h7C+c2h6	1.23E+11	0.0	5201.0
4153.	CHD13+c2h2=c6h6+c2h4	3.09E+10	0.0	27151.0
4154.	CHD13+c2h3=c6h7C+c2h4	1.23E+11	0.0	5201.0
4155.	CHD13+ac3h5=c6h7C+c3h6	1.23E+11	0.0	5201.0
4156.	CHD13+hco=c6h7C+ch2o	1.23E+11	0.0	5201.0
4157.	CHD13+ch3o=c6h7C+ch3oh	1.23E+11	0.0	5201.0
4158.	CHD13+nc4h5=c6h7C+c4h6	1.00E+11	0.0	13500.0
4159.	CHD13+ic4h5=c6h7C+c4h6	1.00E+11	0.0	13500.0
4160.	CHD14=c6h6+H2	2.30E+12	0.0	43800.0
4161.	CHD14=c6h7C+H	3.10E+14	0.0	77400.0
4162.	CHD14+o2=c6h7C+ho2	7.20E+12	0.0	27920.0
4163.	CHD14+ho2=c6h7C+h2o2	1.28E+04	2.6	12400.0
4164.	CHD14+H=c6h7C+H2	1.10E+05	2.5	-1900.0
4165.	CHD14+oh=c6h7C+h2o	6.00E+06	2.0	-1520.0
4166.	CHD14+ch3=c6h7C+ch4	2.00E+11	0.0	7300.0
4167.	c2h2+nc4h5(+M)=c6h7C(+M)	4.80E+07	0.3	4700.0
0	Low pressure limit:	5.20E+25	-4.21	40000.0
4168.	c6h7C=>c6h6+H	1.00E+10	0.0	0.0
4169.	c6h7C+o2=c6h6+ho2	1.00E+12	0.0	0.0
4170.	c6h7C+ho2=c6h6+h2o2	1.00E+12	0.0	0.0
4171.	c6h7C+oh=c6h6+h2o	6.02E+12	0.0	0.0
4172.	c6h7C+O=c6h6+oh	1.80E+13	0.0	0.0
4173.	c6h7C+H=c6h6+H2	3.16E+12	0.0	0.0
4174.	c6h7C+ch3=c6h6+ch4	1.00E+13	0.0	0.0
4175.	c6h7C+c2h3=c6h6+c2h4	4.00E+12	0.0	0.0
4176.	c6h7C+c2h5=c6h6+c2h6	4.00E+12	0.0	0.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

4177.	c6h7C+ac3h5=c6h6+c3h6	4.00E+12	0.0	0.0
4178.	c6h7C+sc3h5=c6h6+c3h6	4.00E+12	0.0	0.0
4179.	c6h7C+tc3h5=c6h6+c3h6	4.00E+12	0.0	0.0
4180.	c6h7C+hco=c6h6+ch2o	4.00E+12	0.0	0.0
4181.	c6h7C+c6h7C=c6h6+CHD13	8.40E+10	0.0	-300.0
4182.	c6h7C+H=c6h615+H2	2.00E+13	0.0	0.0
4183.	c6h7C+ho2=>CPD+hco+oh	4.50E+12	0.0	0.0
4184.	c6h7C+O=CPD+hco	8.26E+13	0.0	0.0
4185.	cyc5h8=c3h6+c2h2	2.50E+13	0.0	62970.0
4186.	cyc5h8=CPD+H2	1.58E+13	0.0	59780.0
4187.	cyc5h8+o2=cyc5h7+ho2	1.28E+10	0.0	25000.0
4188.	cyc5h8+ho2=cyc5h7+h2o2	1.60E+11	0.0	17060.0
4189.	cyc5h8+oh=cyc5h7+h2o	4.80E+13	0.0	300.0
4190.	cyc5h8+O=cyc5h7+oh	2.78E+11	0.0	2508.0
4191.	cyc5h7=ac3h4+c2h3	3.16E+14	0.0	37000.0
4192.	cyc5h7=CPD+H	3.16E+15	0.0	36000.0
4193.	cyc5h7=c5h7	2.00E+13	0.0	30000.0
4194.	cyc5h7+o2=acrol+ch2hco	4.00E+10	0.0	5000.0
4195.	cyc5h7+o2=CPD+ho2	1.01E+12	0.0	13353.0
4196.	cyc5h7+ho2=CPD+h2o2	2.65E+12	0.0	0.0
4197.	cyc5h7+oh=CPD+h2o	6.02E+12	0.0	0.0
4198.	cyc5h7+O=CPD+oh	1.80E+13	0.0	0.0
4199.	cyc5h7+H=CPD+H2	3.16E+13	0.0	0.0
4200.	cyc6h12=3c2h4	8.22E+17	0.0	87225.0
4201.	cyc6h12=cyc6h11+H	3.00E+16	0.0	95000.0
4202.	cyc6h12+o2=cyc6h11+ho2	7.50E+13	0.0	49000.0
4203.	cyc6h12+ho2=cyc6h11+h2o2	1.20E+13	0.0	17057.0
4204.	cyc6h12+oh=cyc6h11+h2o	1.60E+07	2.0	-681.0
4205.	cyc6h12+O=cyc6h11+oh	1.54E+14	0.0	4497.0
4206.	cyc6h12+H=cyc6h11+H2	6.00E+14	0.0	8373.0
4207.	cyc6h12+ch3=cyc6h11+ch4	1.35E+12	0.0	9540.0
4208.	cyc6h12+c2h5=cyc6h11+c2h6	1.35E+12	0.0	9540.0
4209.	cyc6h12+c2h3=cyc6h11+c2h4	1.35E+12	0.0	9540.0
4210.	cyc6h12+ac3h5=cyc6h11+c3h6	1.35E+12	0.0	9540.0
4211.	cyc6h12+sc3h5=cyc6h11+c3h6	1.35E+12	0.0	9540.0
4212.	cyc6h12+tc3h5=cyc6h11+c3h6	1.35E+12	0.0	9540.0
4213.	cyc6h12+Cc4h7-1=cyc6h11+c4h8	7.00E+11	0.0	9540.0
4214.	cyc6h12+hco=cyc6h11+ch2o	1.35E+12	0.0	9540.0
4215.	cyc6h12+ch3o=cyc6h11+ch3oh	4.32E+11	0.0	4473.0
4216.	cyc6h11+o2=cyc6h10+ho2	1.00E+09	0.0	3000.0
4217.	cyc6h11+O=cyc6h10+oh	9.64E+13	0.0	0.0
4218.	cyc6h11+ho2=cyc6h10+h2o2	2.00E+12	0.0	2000.0
4219.	cyc6h11+oh=cyc6h10+h2o	4.80E+13	0.0	0.0
4220.	cyc6h11+H=cyc6h10+H2	2.00E+11	0.0	0.0
4221.	cyc6h11+ch3=cyc6h10+ch4	4.00E+12	0.0	0.0
4222.	cyc6h11+c2h3=cyc6h10+c2h4	4.00E+12	0.0	0.0
4223.	cyc6h11+c2h5=cyc6h10+c2h6	4.00E+12	0.0	0.0
4224.	cyc6h11+ac3h5=cyc6h10+c3h6	4.00E+11	0.0	0.0
4225.	cyc6h11+sc3h5=cyc6h10+c3h6	4.00E+11	0.0	0.0
4226.	cyc6h11+tc3h5=cyc6h10+c3h6	4.00E+12	0.0	0.0
4227.	cyc6h11+hco=cyc6h10+ch2o	4.00E+12	0.0	0.0
4228.	cyc6h11=cyc6h10+H	5.00E+12	0.0	40000.0
4229.	cyc6h11+o2=chxqjA	1.50E+09	0.0	0.0
4230.	chxqjA=cyc6h10+ho2	2.85E+12	0.0	29000.0
4231.	chxqjA=chxqArC	4.28E+09	1.0	28226.6
4232.	chxqArC=chxo-AC+oh	1.40E+12	0.0	20000.0
4233.	chxqArC+o2=chxqAqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
4234.	chxqAqjC=oh+chxoAqC	1.07E+09	1.0	24365.9
4235.	chxqAqjC=chxqAqCrE	2.14E+09	1.0	28226.6
4236.	chxoAqC=chxoAojC+oh	1.50E+16	0.0	42000.0
4237.	Fc6oAoC=chxoAojC	1.00E+08	0.9	5900.0
4238.	c2h4+ch2coch2hco=Fc6oAoC	1.32E+04	2.5	6130.0
4239.	ch2co+ch2hco=ch2coch2hco	1.76E+04	2.5	6130.0
4240.	Fc6oAoE=chxoAojC	1.00E+08	0.9	5900.0
4241.	ch2co+ch2ch2ch2hco=Fc6oAoE	1.32E+04	2.5	6130.0
4242.	c6e5oAqC+oh=chxqAqCrE	4.76E+07	1.5	34700.0
4243.	c6e5oAojC+oh=c6e5oAqC	1.81E+13	0.0	0.0
4244.	ac3h5hco+ch2hco=c6e5oAojC	1.00E+11	0.0	3496.0
4245.	chxo-AC+oh=Cchxone+h2o	3.40E+06	1.9	-1451.0
4246.	chxo-AC+H=Cchxone+H2	1.20E+06	2.4	2583.0
4247.	chxo-AC+ch3=Cchxone+ch4	1.79E+04	2.3	6147.0
4248.	chxo-AC+ho2=Cchxone+h2o2	3.00E+04	2.5	12260.0
4249.	cyc6h10=c4h6+c2h4	1.50E+15	0.0	66900.0
4250.	cyc6h10+o2=cyc6h9+ho2	7.20E+13	0.0	34800.0
4251.	cyc6h10+o2=chxe1rD+ho2	4.00E+13	0.0	50700.0
4252.	cyc6h10=cyc6h9+H	1.20E+15	0.0	83200.0
4253.	cyc6h10=chxe1rD+H	1.20E+15	0.0	98900.0
4254.	cyc6h10=CHD13+H2	5.00E+13	0.0	61700.0
4255.	cyc6h10+O=cyc6h9+oh	1.80E+11	0.7	3250.0
4256.	cyc6h10+H=cyc6h9+H2	1.10E+05	2.5	-1900.0
4257.	cyc6h10+oh=cyc6h9+h2o	6.00E+06	2.0	-1520.0
4258.	cyc6h10+ho2=cyc6h9+h2o2	1.30E+04	2.6	12400.0
4259.	cyc6h10+ch3=cyc6h9+ch4	2.00E+11	0.0	7300.0
4260.	cyc6h10+c2h3=cyc6h9+c2h4	2.00E+11	0.0	7300.0
4261.	cyc6h10+c2h5=cyc6h9+c2h6	2.00E+11	0.0	7300.0
4262.	cyc6h10+ac3h5=cyc6h9+c3h6	2.00E+11	0.0	7300.0
4263.	cyc6h10+sc3h5=cyc6h9+c3h6	2.00E+11	0.0	7300.0
4264.	cyc6h10+tc3h5=cyc6h9+c3h6	2.00E+11	0.0	7300.0
4265.	cyc6h10+hco=cyc6h9+ch2o	2.00E+11	0.0	7300.0
4266.	cyc6h10+ch3o=cyc6h9+ch3oh	2.00E+11	0.0	7300.0
4267.	cyc6h10+O=chxe1rD+oh	5.20E+13	0.0	5200.0
4268.	cyc6h10+H=chxe1rD+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
4269.	cyc6h10+oh=chxe1rD+h2o	5.20E+06	2.0	-770.0
4270.	cyc6h10+ho2=chxe1rD+h2o2	8.00E+11	0.0	15500.0
4271.	cyc6h10+ch3=chxe1rD+ch4	4.00E+11	0.0	9600.0
4272.	chxone+oh=Bchxone+h2o	1.69E+12	0.0	-228.0
4273.	chxone+H=Bchxone+H2	8.92E+06	2.0	3200.0
4274.	chxone+o2=Bchxone+ho2	3.10E+13	0.0	41970.0
4275.	chxone+ho2=Bchxone+h2o2	4.00E+11	0.0	8698.0
4276.	chxone+ch3=Bchxone+ch4	3.48E+00	3.5	3680.0
4277.	chxone+O=Bchxone+oh	6.14E+13	0.0	3400.0
4278.	chxone+oh=Cchxone+h2o	1.10E+13	0.0	790.0
4279.	chxone+H=Cchxone+H2	2.60E+06	2.4	2583.0
4280.	chxone+o2=Cchxone+ho2	1.40E+13	0.0	49910.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

4281.	chxone+ho2=Cchxone+h2o2	1.93E+04	2.6	13910.0
4282.	chxone+ch3=Cchxone+ch4	3.02E+00	3.5	5481.0
4283.	chxone+O=Cchxone+oh	1.10E+06	2.5	2830.0
4284.	chxone+oh=Dchxone+h2o	5.50E+12	0.0	790.0
4285.	chxone+H=Dchxone+H2	1.30E+06	2.4	2583.0
4286.	chxone+o2=Dchxone+ho2	7.00E+12	0.0	49910.0
4287.	chxone+ho2=Dchxone+h2o2	9.51E+03	2.6	13910.0
4288.	chxone+ch3=Dchxone+ch4	1.51E+00	3.5	5481.0
4289.	chxone+O=Dchxone+oh	5.50E+05	2.5	2830.0
4290.	Bchxone=H+chxe2oA	1.20E+13	0.0	38200.0
4291.	Bchxone+o2=chxe2oA+ho2	1.00E+09	0.0	0.0
4292.	Fc6e1oC=Bchxone	1.00E+08	0.9	5900.0
4293.	Cchxone=H+chxe2oA	1.20E+13	0.0	33820.0
4294.	Cchxone=H+chxe3oA	1.20E+13	0.0	38115.0
4295.	Cchxone+o2=chxe2oA+ho2	1.00E+09	0.0	0.0
4296.	Cchxone+o2=chxe3oA+ho2	1.00E+09	0.0	0.0
4297.	c6e5oyA=Cchxone	1.00E+08	0.9	5900.0
4298.	Ac6e5oC=Cchxone	1.00E+08	0.9	5900.0
4299.	c2h4+ac3h5co=Ac6e5oC	1.00E+11	0.0	7800.0
4300.	Dchxone=H+chxe3oA	1.20E+13	0.0	37315.0
4301.	Dchxone+o2=chxe3oA+ho2	1.00E+09	0.0	0.0
4302.	Ac6e5oB=Dchxone	1.00E+08	0.9	5900.0
4303.	ch2co+Dc4h7-1=Ac6e5oB	3.33E+10	0.0	6397.0
4304.	Bchxone+o2=chxoqjB	2.43E+39	-9.0	8620.0
4305.	chxoqjB=DchxoqB	3.72E+11	0.0	24076.6
4306.	DchxoqB+o2=chxoqBqjD	7.54E+12	0.0	0.0
4307.	DchxoqB=c6e5oAoB+oh	5.50E+13	0.0	25500.0
4308.	chxoqBqjD=chxoAoBqD+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
4309.	chxoAoBqD=chxoAoBojD+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
4310.	Fc6oAoDoE=chxoAoBojD	1.00E+08	0.9	5900.0
4311.	Fc6oAoCoD=chxoAoBojD	1.00E+08	0.9	5900.0
4312.	Fc6oAoDoE=ch2co+choch2ch2co	2.00E+13	0.0	21350.0
4313.	Fc6oAoCoD=c2h4+2co+ch2hco	2.00E+13	0.0	28700.0
4314.	c6e5oAoB+oh=c6e5oyAoB+h2o	2.30E+10	0.7	-1100.0
4315.	c6e5oAoB+H=c6e5oyAoB+H2	4.10E+09	1.2	2405.0
4316.	c6e5oAoB+ho2=c6e5oyAoB+h2o2	3.00E+12	0.0	12000.0
4317.	c6e5oAoB+ch3=c6e5oyAoB+ch4	7.60E+00	3.4	3740.0
4318.	c6e5oAoB+o2=c6e5oyAoB+ho2	3.00E+13	0.0	39200.0
4319.	c6e5oyAoB=c4h7co-1+co	2.00E+13	0.0	28700.0
4320.	c6e5oyAoB+ho2=>c4h7co-1+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
4321.	c6e5oA+oh=c6e5oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
4322.	c6e5oA+H=c6e5oyA+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
4323.	c6e5oA+ho2=c6e5oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
4324.	c6e5oyA=Ec5h9-1+co	2.00E+13	0.0	28700.0
4325.	c6e5oyA+ho2=>Ec5h9-1+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
4326.	chxe2oA+o2=>Dchxe2oA+ho2	4.00E+12	0.0	40000.0
4327.	chxe2oA+ho2=>Dchxe2oA+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
4328.	chxe2oA+oh=>Dchxe2oA+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
4329.	chxe2oA+O=>Dchxe2oA+oh	2.60E+12	0.0	4500.0
4330.	chxe2oA+H=>Dchxe2oA+H2	1.95E+13	0.0	4445.0
4331.	chxe2oA+ch3=>Dchxe2oA+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4332.	chxe3oA+o2=>Dchxe2oA+ho2	4.00E+12	0.0	40000.0
4333.	chxe3oA+ho2=>Dchxe2oA+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
4334.	chxe3oA+oh=>Dchxe2oA+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
4335.	chxe3oA+O=>Dchxe2oA+oh	2.60E+12	0.0	4500.0
4336.	chxe3oA+H=>Dchxe2oA+H2	1.95E+13	0.0	4445.0
4337.	chxe3oA+ch3=>Dchxe2oA+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4338.	Dchxe2oA+o2=ho2+che24one	5.90E+05	0.0	0.0
4339.	Ac6e3e5oB=Dchxe2oA	1.00E+08	0.9	5900.0
4340.	ch2co+nc4h5=Ac6e3e5oB	2.00E+11	0.0	2010.0
4341.	chxoAoD+oh=BchxoAoD+h2o	3.38E+12	0.0	-228.0
4342.	chxoAoD+H=BchxoAoD+H2	1.79E+07	2.0	3200.0
4343.	chxoAoD+ho2=BchxoAoD+h2o2	8.00E+11	0.0	8698.0
4344.	chxe2oAoD+H=BchxoAoD	6.25E+11	0.5	2620.0
4345.	c6e1oCoyF=BchxoAoD	1.00E+08	0.9	5900.0
4346.	c6e1oCoyF=co+c2h3coc2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
4347.	chxe2oAoD+oh=Echxe2oAoD+h2o	1.69E+12	0.0	-228.0
4348.	chxe2oAoD+H=Echxe2oAoD+H2	8.96E+06	2.0	3200.0
4349.	chxe2oAoD+ho2=Echxe2oAoD+h2o2	4.00E+11	0.0	8698.0
4350.	c6h4o2+H=Echxe2oAoD	6.25E+11	0.5	2620.0
4351.	c6e2e5oyAoD=Echxe2oAoD	1.00E+08	0.9	5900.0
4352.	c6e2e5oyAoD=co+c2h3co+c2h2	2.00E+13	0.0	28700.0
4353.	Gc7h13-1=mchA	1.00E+08	0.9	5900.0
4354.	Gc7h13-1=Cc7h13-1	1.00E+12	0.0	22880.0
4355.	Gc7h13-1=Dc7h13-1	1.00E+11	0.0	18100.0
4356.	c2h4+Ec5h9-1=Gc7h13-1	2.64E+04	2.5	6130.0
4357.	mchA+o2=mche1+ho2	8.00E+12	0.0	10000.0
4358.	mchA+H=mche1+H2	2.00E+11	0.0	0.0
4359.	mchA+oh=mche1+h2o	5.00E+13	0.0	0.0
4360.	mchA+O=mche1+oh	1.00E+14	0.0	0.0
4361.	mchA+ch3=mche1+ch4	4.00E+12	0.0	0.0
4362.	mchB=c2h4+ISOPH	2.00E+13	0.0	45000.0
4363.	mchB+H=mche1+H2	2.00E+11	0.0	0.0
4364.	mchB+oh=mche1+h2o	5.00E+13	0.0	0.0
4365.	mchB+O=mche1+oh	1.00E+14	0.0	0.0
4366.	mchB+ch3=mche1+ch4	4.00E+12	0.0	0.0
4367.	mche1=>c4h6+c3h6	1.00E+16	0.0	71000.0
4368.	mche1+oh=cyc6h11+ch2o	1.00E+12	0.0	0.0
4369.	mche1+oh=ch3+chxone	1.00E+12	0.0	0.0
4370.	mche1+H=mchB	2.64E+13	0.0	2160.0
4371.	mche1+H=mchA	1.32E+13	0.0	4660.0
4372.	mche1+H=Cmche1+H2	1.10E+05	2.5	-1900.0
4373.	mche1+O=Cmche1+oh	1.80E+11	0.7	3250.0
4374.	mche1+oh=Cmche1+h2o	6.00E+06	2.0	-1520.0
4375.	mche1+ho2=Cmche1+h2o2	1.30E+04	2.6	12400.0
4376.	mche1+ch3=Cmche1+ch4	2.00E+11	0.0	7300.0
4377.	mche1+o2=Dmche1+ho2	4.00E+13	0.0	50700.0
4378.	mche1+O=Dmche1+oh	5.20E+13	0.0	5200.0
4379.	mche1+H=Dmche1+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
4380.	mche1+oh=Dmche1+h2o	5.20E+06	2.0	-770.0
4381.	mche1+ho2=Dmche1+h2o2	8.00E+11	0.0	15500.0
4382.	mche1+ch3=Dmche1+ch4	4.00E+11	0.0	9600.0
4383.	mche1+oh=BmchohA	4.75E+12	0.0	-782.0
4384.	BmchohA+o2=mchohAqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

4385.	mchohAqjB=>oh+ch2o+chxone	1.00E+16	0.0	25000.0
4386.	Cmche1=>c2h4+ISOPY	2.00E+13	0.0	38000.0
4387.	Cmche1=H+mche13	1.20E+13	0.0	43500.0
4388.	Cmche1+o2=ch2co+Ec5oA	3.01E+10	0.0	2870.0
4389.	Dmche1+o2=ho2+mche13	9.60E+12	0.0	2500.0
4390.	Dmche1=H+mche13	3.20E+13	0.0	34500.0
4391.	Dmche1+o2=ho2+mche14	9.60E+12	0.0	5000.0
4392.	Dmche1=H+mche14	3.00E+13	0.0	33800.0
4393.	mche13+H=Emche13+H2	6.55E+12	0.0	4445.0
4394.	mche13+O=Emche13+oh	1.30E+12	0.0	4500.0
4395.	mche13+oh=Emche13+h2o	3.00E+12	0.0	1230.0
4396.	mche13+ho2=Emche13+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
4397.	mche13+ch3=Emche13+ch4	2.00E+11	0.0	6800.0
4398.	mche13+H=Gmche13+H2	6.55E+12	0.0	4445.0
4399.	mche13+O=Gmche13+oh	1.30E+12	0.0	4500.0
4400.	mche13+oh=Gmche13+h2o	3.00E+12	0.0	1230.0
4401.	mche13+ho2=Gmche13+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
4402.	mche13+ch3=Gmche13+ch4	2.00E+11	0.0	6800.0
4403.	mche14+H=Emche13+H2	5.50E+04	2.5	-1900.0
4404.	mche14+O=Emche13+oh	9.00E+10	0.7	3250.0
4405.	mche14+oh=Emche13+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
4406.	mche14+ho2=Emche13+h2o2	6.50E+03	2.6	12400.0
4407.	mche14+ch3=Emche13+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4408.	mche14+H=Gmche14+H2	5.50E+04	2.5	-1900.0
4409.	mche14+O=Gmche14+oh	9.00E+10	0.7	3250.0
4410.	mche14+oh=Gmche14+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
4411.	mche14+ho2=Gmche14+h2o2	6.50E+03	2.6	12400.0
4412.	mche14+ch3=Gmche14+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4413.	mche14+H=Fmche14+H2	5.50E+04	2.5	-1900.0
4414.	mche14+O=Fmche14+oh	9.00E+10	0.7	3250.0
4415.	mche14+oh=Fmche14+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
4416.	mche14+ho2=Fmche14+h2o2	6.50E+03	2.6	12400.0
4417.	mche14+ch3=Fmche14+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4418.	Gmche13+o2=mche136+ho2	2.00E+09	0.0	-1506.0
4419.	Emche13+o2=mche135+ho2	2.00E+09	0.0	-1506.0
4420.	Gmche14+o2=mche135+ho2	9.60E+12	0.0	2500.0
4421.	Fmche14+o2=mche135+ho2	9.60E+12	0.0	2500.0
4422.	mche135+H=phch2+H2	5.50E+04	2.5	-1900.0
4423.	mche135+O=phch2+oh	9.00E+10	0.7	3250.0
4424.	mche135+oh=phch2+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
4425.	mche135+ho2=phch2+h2o2	6.50E+03	2.6	12400.0
4426.	mche135+ch3=phch2+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4427.	mche136+H=phch2+H2	5.50E+04	2.5	-1900.0
4428.	mche136+O=phch2+oh	9.00E+10	0.7	3250.0
4429.	mche136+oh=phch2+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
4430.	mche136+ho2=phch2+h2o2	6.50E+03	2.6	12400.0
4431.	mche136+ch3=phch2+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4432.	mchoA+oh=chxco+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
4433.	mchoA+H=chxco+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
4434.	mchoA+ho2=chxco+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
4435.	chxco=cyc6h11+co	2.00E+13	0.0	28700.0
4436.	chxco+ho2=>cyc6h11+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
4437.	c7e6oyA=AmchoC	1.00E+08	0.9	5900.0
4438.	Gc7e1oC=AmchoC	1.00E+08	0.9	5900.0
4439.	c2h4+Ec5e1oC=Gc7e1oC	1.32E+04	2.5	6130.0
4440.	c2h4+c2h3co=Ec5e1oC	1.00E+11	0.0	7800.0
4441.	Ac7e6oB=AmchoD	1.00E+08	0.9	5900.0
4442.	Gc7e1oD=AmchoD	1.00E+08	0.9	5900.0
4443.	Cc5h9-1+ch2co=Ac7e6oB	1.00E+11	0.0	11900.0
4444.	c2h4+Ac5e4oB=Gc7e1oD	1.32E+04	2.5	6130.0
4445.	ch2co+ac3h5=Ac5e4oB	1.00E+11	0.0	11900.0
4446.	Gc7e1oF=AmchoD	1.00E+08	0.9	5900.0
4447.	ch2co+Ec5h9-1=Gc7e1oF	1.76E+04	2.5	6130.0
4448.	echA=c2h4+cyc6h11	2.00E+13	0.0	29000.0
4449.	echA+o2=eche1+ho2	8.00E+12	0.0	10000.0
4450.	echA+H=eche1+H2	2.00E+11	0.0	0.0
4451.	echA+oh=eche1+h2o	5.00E+13	0.0	0.0
4452.	echA+O=eche1+oh	1.00E+14	0.0	0.0
4453.	echA+ch3=eche1+ch4	4.00E+12	0.0	0.0
4454.	eche1=>c4h6+c2h4+c2h4	1.00E+16	0.0	71000.0
4455.	eche1+oh=mchA+ch2o	2.60E+13	0.0	0.0
4456.	eche1+H=Ceche1+H2	9.75E+12	0.0	4445.0
4457.	eche1+O=Ceche1+oh	1.30E+12	0.0	4500.0
4458.	eche1+oh=Ceche1+h2o	2.09E+06	2.0	-543.0
4459.	eche1+ho2=Ceche1+h2o2	5.00E+10	0.0	17060.0
4460.	eche1+o2=Ceche1+ho2	2.00E+12	0.0	40000.0
4461.	eche1+ch3=Ceche1+ch4	5.00E+10	0.0	7300.0
4462.	Ceche1=>2c2h4+ic4h5	2.00E+13	0.0	38900.0
4463.	echoA+oh=>h2o+echoyA	4.20E+12	0.0	500.0
4464.	echoA+H=>H2+echoyA	4.00E+13	0.0	4200.0
4465.	echoA+ho2=>h2o2+echoyA	1.00E+12	0.0	10000.0
4466.	echoyA=>co+mchA	2.00E+13	0.0	28700.0
4467.	echoyA+ho2=>oh+co2+mchA	2.00E+13	0.0	0.0
4468.	echoAoD+oh=echoyAoD+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
4469.	echoAoD+H=echoyAoD+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
4470.	echoAoD+ho2=echoyAoD+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
4471.	echoyAoD=AmchoC+co	2.00E+13	0.0	28700.0
4472.	echoyAoD+ho2=>AmchoC+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
4473.	mchoAoC+oh=h2o+mchoyAoC	4.20E+12	0.0	500.0
4474.	mchoAoC+H=H2+mchoyAoC	4.00E+13	0.0	4200.0
4475.	mchoAoC+ho2=h2o2+mchoyAoC	1.00E+12	0.0	10000.0
4476.	mchoyAoC=co+Bchxone	2.00E+13	0.0	28700.0
4477.	mchoyAoC+ho2=>Bchxone+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
4478.	c3h3+c3h3=c6h615	4.00E+12	0.0	0.0
4479.	c6h615=hex1245	1.80E+11	0.0	35804.0
4480.	hex1245=Mc6h6	5.00E+11	0.0	22081.0
4481.	Mc6h6=FULVENE	4.26E+13	0.0	49282.0
4482.	Mc6h6=c6h6	3.79E+13	0.0	22000.0
4483.	CPD+o2=c5h5+ho2	2.00E+13	0.0	25000.0
4484.	CPD+ho2=c5h5+h2o2	2.00E+12	0.0	11660.0
4485.	CPD+oh=c5h5+h2o	3.43E+09	1.2	-447.0
4486.	CPD+H=c5h5+H2	2.19E+08	1.8	3000.0
4487.	CPD+H=c3h3+c2h4	2.00E+14	0.0	10000.0
4488.	CPD+O=c5h5+oh	1.81E+13	0.0	3080.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

4489.	CPD+ch3=c5h5+ch4					3.11E+11	0.0	5500.0	4539.	c6h5oh+c2h3=c6h5o+c2h4				3.00E+02	3.0	7650.0
4490.	CPD+c2h3=c5h5+c2h4					3.11E+11	0.0	5500.0	4540.	c6h5oh+nc4h5=c6h5o+c4h6				3.00E+02	3.0	7650.0
4491.	CPD+c2h5=c5h5+c2h6					3.11E+11	0.0	5500.0	4541.	c6h5oh+ic4h5=c6h5o+c4h6				3.00E+02	3.0	7650.0
4492.	CPD+nc4h5=c5h5+c4h6					3.11E+11	0.0	5500.0	4542.	c6h5o+CPD=c6h5oh+c5h5				3.20E+11	0.0	8000.0
4493.	CPD+ic4h5=c5h5+c4h6					3.11E+11	0.0	5500.0	4543.	c6h5oh+c6h5=c6h5o+c6h6				3.00E+02	3.0	7650.0
4494.	CPD+c6h5=c5h5+c6h6					3.11E+11	0.0	5500.0	4544.	c6h5o=c5h5+co				7.40E+11	0.0	43917.0
4495.	CPD+o2=>c3h4o+ch2co					3.00E+08	0.0	3000.0	4545.	c6h5o+H(+M)=c6h5oh(+M)				2.50E+14	0.0	0.0
4496.	c5h5+ho2=c5h5o+oh					3.00E+13	0.0	0.0		Low pressure limit:				1E+94	-21,84	13880
4497.	c5h5+oh=c5h4oh+H					9.00E+13	0.0	0.0		TROE centering	0.043	304.0	60000.0	5900.0		
4498.	c5h5+oh=c4h6+co					4.00E+14	0.0	4500.0	4546.	c6h5o+H=CPD+co				1.06E+53	-10.7	41360.0
4499.	c5h5+H(+M)=CPD(+M)					1.00E+14	0.0	0.0	4547.	c6h5o+O=c5h5+co2				1.00E+13	0.0	0.0
	Low pressure limit:					4,4E+80	-18,28	12994	4548.	che24one=>c6h5o+H				1.40E+15	0.0	54000.0
	TROE centering	0,.068	400.0	4136.0	5500.0				4549.	che24one+H=cyc5h7+co				2.51E+13	0.0	4700.0
4500.	c5h5+O=c5h4o+H					5.81E+13	0.0	20.0	4550.	che24one+o2=c6h5o+ho2				4.00E+12	0.0	40000.0
4501.	c5h5+O=nc4h5+co					2.00E+14	0.0	0.0	4551.	che24one+ho2=c6h5o+h2o2				9.63E+03	2.6	13910.0
4502.	c5h4oh=c5h4o+H					2.10E+13	0.0	48000.0	4552.	che24one+oh=c6h5o+h2o				3.12E+06	2.0	-298.0
4503.	c5h5o=nc4h5+co					2.51E+11	0.0	43900.0	4553.	che24one+O=c6h5o+oh				2.60E+12	0.0	4500.0
4504.	c5h4o+H=nc4h5+co					2.10E+61	-13.3	40810.0	4554.	che24one+H=c6h5o+H2				1.95E+13	0.0	4445.0
4505.	c5h4o=>co+c4h4					1.00E+12	0.0	53000.0	4555.	che24one+ch3=c6h5o+ch4				1.00E+11	0.0	7300.0
4506.	c3h3+ac3h4=c6h6+H					1.40E+12	0.0	12800.0	4556.	nc4h5+ac3h4=toluen+H				2.00E+11	0.0	3700.0
4507.	c3h3+pc3h4=c6h6+H					1.40E+12	0.0	12800.0	4557.	nc4h5+pc3h4=toluen+H				6.32E+11	0.0	3700.0
4508.	c4h4+c2h3=c6h6+H					1.90E+12	0.0	3510.0	4558.	toluen=c6h5+ch3				1.40E+16	0.0	99800.0
4509.	nc4h3+c2h3=c6h6					2.87E+14	0.0	817.0	4559.	toluen=phch2+H				3.00E+15	0.0	88194.0
4510.	c6h6=c4h4+c2h2					9.00E+15	0.0	107430.0	4560.	toluen+o2=phch2+ho2				3.00E+14	0.0	43062.0
4511.	c6h6+o2=c6h5+ho2					6.30E+13	0.0	60000.0	4561.	toluen+ho2=phch2+h2o2				3.00E+14	0.0	22010.0
4512.	c6h6+ho2=c6h5+h2o2					5.40E+04	2.5	27620.0	4562.	toluen+oh=phch2+h2o				1.77E+05	2.4	-602.0
4513.	c6h6+oh=c6h5+h2o					1.69E+13	0.0	4574.0	4563.	toluen+oh=c6h5oh+ch3				7.83E+02	2.9	3221.0
4514.	c6h6+H=c6h5+H2					2.50E+14	0.0	16000.0	4564.	toluen+O=phch2+oh				6.30E+11	0.0	0.0
4515.	c6h6+O=c6h5o+H					3.56E+01	3.8	940.0	4565.	toluen+H=phch2+H2				1.26E+14	0.0	8364.0
4516.	c6h6+ch3=c6h5+ch4					2.00E+12	0.0	15000.0	4566.	toluen+H=c6h6+ch3				2.40E+13	0.0	5123.0
4517.	c6h6+c2h5=c6h5+c2h6					2.00E+12	0.0	15000.0	4567.	toluen+ch3=phch2+ch4				8.88E+10	0.0	8754.0
4518.	c6h6+c2h3=c6h5+c2h4					2.00E+12	0.0	15000.0	4568.	toluen+c2h5=phch2+c2h6				1.01E+11	0.0	9514.0
4519.	c6h6+nc4h5=c6h5+c4h6					2.00E+12	0.0	15000.0	4569.	toluen+c6h5=phch2+c6h6				2.10E+12	0.0	4400.0
4520.	c6h6+ic4h5=c6h5+c4h6					2.00E+12	0.0	15000.0	4570.	toluen+nc4h5=phch2+c4h6				4.00E+12	0.0	7500.0
4521.	c6h6+O=c6h5+oh					2.00E+13	0.0	14700.0	4571.	toluen+c2h3=phch2+c2h4				4.00E+12	0.0	7500.0
4522.	nc4h3+c2h2=c6h5					2.80E+03	2.9	1400.0	4572.	phch2=c4h4+c3h3				2.00E+14	0.0	83600.0
4523.	c6h5+o2=c6h5o+O					6.27E+12	0.0	7470.0	4573.	phch2=c5h5+c2h2				6.03E+13	0.0	70000.0
4524.	c6h4o2=c5h4o+co					1.00E+12	0.0	40000.0	4574.	phch2+o2=phhco+oh				6.31E+12	0.0	43000.0
4525.	c6h5+H=c6h6					2.20E+14	0.0	0.0	4575.	phch2+ho2=phch2o+oh				2.00E+13	0.0	0.0
4526.	c6h5+ho2=c6h5o+oh					5.00E+13	0.0	1000.0	4576.	phch2+oh=phch2oh				2.00E+13	0.0	0.0
4527.	c6h5+oh=c6h5o+H					5.00E+13	0.0	0.0	4577.	phch2+O=phhco+H				1.58E+13	0.0	0.0
4528.	c6h5+c2h=phc2h					3.00E+08	0.0	1391.0	4578.	phch2+O=c6h5+ch2o				1.00E+13	0.0	0.0
4529.	c6h5+c2h4=styren+H					1.43E+08	1.2	3540.0	4579.	phch2+c3h3=toluen+c3h2				1.00E+12	0.0	0.0
4530.	c6h5+c2h2=phc2h+H					1.00E+13	0.0	7647.0	4580.	phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o				1.05E+11	0.0	9500.0
4531.	c6h5+c4h2=phc2h+c2h					2.00E+13	0.0	0.0	4581.	phch2oh+o2=>phhco+ho2+H				2.00E+14	0.0	41400.0
4532.	c6h5+c4h4=phc2h+c2h3					1.00E+13	0.0	7647.0	4582.	phch2oh+oh=>phhco+h2o+H				8.43E+12	0.0	2583.0
4533.	c6h5oh+oh=c6h5o+h2o					6.00E+12	0.0	0.0	4583.	phch2oh+H=c6h6+ch2oh				1.20E+13	0.0	5148.0
4534.	c6h5oh+H=c6h6+oh					2.21E+13	0.0	7910.0	4584.	phch2oh+phch2=>phhco+toluen+H				2.11E+11	0.0	9500.0
4535.	c6h5oh+H=c6h5o+H2					1.15E+14	0.0	12400.0	4585.	phch2oh+c6h5=>phhco+c6h6+H				1.40E+12	0.0	4400.0
4536.	c6h5oh+O=c6h5o+oh					2.81E+13	0.0	7352.0	4586.	phch2o=phhco+H				1.30E+14	0.0	1100.0
4537.	c6h5oh+ch3=c6h5o+ch4					3.00E+02	3.0	7650.0	4587.	phhco=phco+H				3.98E+15	0.0	83701.0
4538.	c6h5oh+c2h5=c6h5o+c2h6					3.00E+02	3.0	7650.0	4588.	phhco+o2=phco+ho2				1.02E+13	0.0	39000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

4589.	phhco+ho2=phco+h2o2	2.00E+12	0.0	11665.0
4590.	phhco+oh=phco+h2o	1.71E+09	1.2	-447.0
4591.	phhco+oh=c6h5oh+hco	1.20E+13	0.0	5123.0
4592.	phhco+O=phco+oh	9.04E+12	0.0	3080.0
4593.	phhco+H=phco+H2	5.00E+13	0.0	4928.0
4594.	phhco+H=c6h6+hco	1.20E+13	0.0	5148.0
4595.	phhco+ch3=phco+ch4	2.77E+03	2.8	5773.0
4596.	phhco+c6h5=phco+c6h6	7.01E+11	0.0	4400.0
4597.	phco=c6h5+co	3.98E+14	0.0	29401.0
4598.	phco+o2=c6h5o+co2	3.00E+10	0.0	2870.0
4599.	phco+ho2=>c6h5+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
4600.	phc2h5=c6h6+c2h4	1.15E+09	0.0	51699.0
4601.	phc2h5=phch2+ch3	5.00E+16	0.0	78127.0
4602.	phc2h5=c6h5+c2h5	5.00E+16	0.0	100399.0
4603.	phc2h5=Bphc2h4+H	2.51E+15	0.0	81260.0
4604.	phc2h5=Aphc2h4+H	8.00E+15	0.0	100226.0
4605.	phc2h5+o2=Aphc2h4+ho2	4.00E+13	0.0	50620.0
4606.	phc2h5+o2=Bphc2h4+ho2	4.00E+13	0.0	38220.0
4607.	phc2h5+H=c2h5+c6h6	2.40E+13	0.0	5123.0
4608.	phc2h5+H=Aphc2h4+H2	7.20E+08	1.5	7412.0
4609.	phc2h5+H=Bphc2h4+H2	3.30E+07	2.0	5346.0
4610.	phc2h5+oh=Aphc2h4+h2o	1.99E+07	1.8	1133.0
4611.	phc2h5+oh=Bphc2h4+h2o	7.09E+06	1.9	-1159.0
4612.	phc2h5+O=Aphc2h4+oh	5.00E+08	1.5	5802.0
4613.	phc2h5+O=Bphc2h4+oh	5.49E+05	2.5	2140.0
4614.	phc2h5+ho2=Aphc2h4+h2o2	1.80E+04	2.5	16792.0
4615.	phc2h5+ho2=Bphc2h4+h2o2	6.80E+03	2.5	10115.0
4616.	phc2h5+ch3=Aphc2h4+ch4	2.75E-01	4.0	8287.0
4617.	phc2h5+ch3=Bphc2h4+ch4	7.50E-01	3.5	4485.0
4618.	Aphc2h4=styren+H	3.16E+13	0.0	50670.0
4619.	Aphc2h4=c6h5+c2h4	1.00E+14	0.0	35000.0
4620.	Bphc2h4=styren+H	1.80E+13	0.0	47025.0
4621.	Bphc2h4+o2=styren+ho2	1.58E+12	0.0	15200.0
4622.	Bphc2h4+O=c6h5+ch3hco	1.60E+13	0.0	0.0
4623.	Bphc2h4+O=phhco+ch3	1.60E+13	0.0	0.0
4624.	Bphc2h4+oh=phhco+ch4	1.60E+13	0.0	0.0
4625.	Bphc2h4+ho2=>phhco+ch3+oh	5.00E+12	0.0	0.0
4626.	nc4h5+c4h4=styren+H	3.16E+11	0.0	3700.0
4627.	c4h4+c4h4=styren	1.48E+14	0.0	38003.0
4628.	c6h5+c2h3=styren	1.00E+13	0.0	0.0
4629.	styren=c6h6+c2h2	1.60E+11	0.0	58438.0
4630.	styren=ASTYRYL+H	5.00E+15	0.0	109400.0
4631.	styren=BSTYRYL+H	5.00E+15	0.0	109400.0
4632.	styren+o2=ASTYRYL+ho2	4.00E+13	0.0	59800.0
4633.	styren+o2=BSTYRYL+ho2	4.00E+13	0.0	59800.0
4634.	styren+oh=ASTYRYL+h2o	5.00E+12	0.0	6936.0
4635.	styren+oh=BSTYRYL+h2o	5.00E+12	0.0	5936.0
4636.	styren+H=ASTYRYL+H2	5.00E+13	0.0	15009.0
4637.	styren+H=BSTYRYL+H2	5.00E+13	0.0	14009.0
4638.	styren+ho2=ASTYRYL+h2o2	7.50E+10	0.0	14190.0
4639.	styren+ho2=BSTYRYL+h2o2	7.50E+10	0.0	13190.0
4640.	styren+O=phch2+hco	1.20E+08	1.4	530.0
4641.	styren+O=c6h5+ch2hco	6.00E+07	1.4	530.0
4642.	styren+c6h5=ASTYRYL+c6h6	2.00E+11	0.0	20000.0
4643.	styren+c6h5=BSTYRYL+c6h6	2.00E+11	0.0	19000.0
4644.	styren+c6h5o=ASTYRYL+c6h5oh	2.00E+11	0.0	20000.0
4645.	styren+c6h5o=BSTYRYL+c6h5oh	2.00E+11	0.0	19000.0
4646.	styren+c5h5=ASTYRYL+CPD	2.00E+11	0.0	20000.0
4647.	styren+c5h5=BSTYRYL+CPD	2.00E+11	0.0	19000.0
4648.	styren+oh=c6h4c2h3+h2o	1.63E+07	1.4	1454.0
4649.	styren+H=>c6h4c2h3+H2	1.90E+07	2.0	9698.0
4650.	styren+ho2=>phch2+hco+oh	2.50E+12	1.0	25000.0
4651.	styren+ho2=>phhco+CH2+oh	2.50E+12	1.0	25000.0
4652.	styren+H=c6h6+c2h3	2.40E+13	0.0	5123.0
4653.	ASTYRYL+H=BSTYRYL+H	1.00E+14	0.0	0.0
4654.	ASTYRYL=c6h5+c2h2	1.00E+14	0.0	36850.0
4655.	ASTYRYL=phc2h+H	3.00E+12	0.0	37830.0
4656.	ASTYRYL+o2=phhco+hco	2.00E+11	0.0	14000.0
4657.	ASTYRYL+c6h5=phc2h+c6h6	1.00E+13	0.0	0.0
4658.	BSTYRYL+o2=phco+ch2o	2.00E+11	0.0	14000.0
4659.	BSTYRYL+O=c6h5+ch2co	1.60E+13	0.0	0.0
4660.	BSTYRYL=phc2h+H	3.00E+12	0.0	48030.0
4661.	BSTYRYL+c6h5=phc2h+c6h6	1.00E+13	0.0	0.0
4662.	BSTYRYL+oh=phc2h+h2o	2.00E+13	0.0	0.0
4663.	BSTYRYL+H=phc2h+H2	5.00E+13	0.0	0.0
4664.	phch2hco+o2=>phch2co+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0
4665.	phch2hco+ho2=>phch2co+h2o2	4.09E+04	2.5	10204.0
4666.	phch2hco+oh=>phch2co+h2o	2.69E+08	1.4	-1574.0
4667.	phch2hco+O=>phch2co+oh	5.85E+12	0.0	1808.0
4668.	phch2hco+H=>phch2co+H2	4.09E+09	1.2	2404.0
4669.	phch2hco+ch3=>phch2co+ch4	3.50E-08	6.2	1639.0
4670.	phch2hco=>phch2+hco	5.00E+16	0.0	71600.0
4671.	phch2hco+H=c6h6+ch2hco	5.78E+13	0.0	8088.0
4672.	phch2co=phch2+co	3.98E+14	0.0	29401.0
4673.	phch2co+o2=phch2o+co2	3.00E+10	0.0	2870.0
4674.	phch2co+ho2=>phch2+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
4675.	phcoch2=c6h5+ch2co	2.00E+13	0.0	51940.0
4676.	phc2h+oh=>c6h6+hcco	1.00E+13	0.0	0.0
4677.	phc2h+H=c6h4c2h+H2	5.00E+13	-0.5	1500.0
4678.	phc2h+oh=c6h4c2h+h2o	1.05E+13	0.0	4565.0
4679.	phc2h+c2h=c6h4c2h+c2h2	2.00E+13	0.0	0.0
4680.	phc2h+O=c6h5cco+H	4.80E+09	1.0	0.0
4681.	phc2h+ch3=c6h4c2h+ch4	1.67E+12	0.0	15057.0
4682.	c6h4c2h+c2h2=A1c2hAC	1.90E+21	-2.9	8100.0
4683.	c6h4c2h+c2h2=A2-X	5.10E+48	-10.5	28000.0
4684.	c6h4c2h+H=phc2h	4.20E+11	0.5	-71.7
4685.	c6h5cco+o2=phco+co2	1.00E+12	0.0	0.0
4686.	pbz=c6h5+nc3h7	1.00E+17	0.0	86500.0
4687.	pbz=phch2+c2h5	8.00E+15	0.0	73500.0
4688.	pbz=Aphc2h4+ch3	1.00E+17	0.0	77500.0
4689.	pbz=pbzjA+H	9.00E+15	0.0	100210.0
4690.	pbz=pbzjB+H	6.00E+15	0.0	99110.0
4691.	pbz=pbzjC+H	6.00E+15	0.0	86210.0
4692.	pbz+o2=pbzjA+ho2	4.00E+13	0.0	50600.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

4693.	pbz+o2=pbzjB+ho2	4.00E+13	0.0	49500.0
4694.	pbz+o2=pbzjC+ho2	4.00E+13	0.0	35800.0
4695.	pbz+H=nc3h7+c6h6	2.40E+13	0.0	5123.0
4696.	pbz+H=pbzjA+H2	1.33E+06	2.5	6756.0
4697.	pbz+H=pbzjB+H2	1.30E+06	2.4	4470.0
4698.	pbz+H=pbzjC+H2	1.01E+04	2.9	1931.0
4699.	pbz+O=pbzjA+oh	1.93E+05	2.7	3716.0
4700.	pbz+O=pbzjB+oh	4.77E+04	2.7	2106.0
4701.	pbz+O=pbzjC+oh	4.77E+04	2.7	1106.0
4702.	pbz+oh=pbzjA+h2o	3.16E+07	1.8	934.0
4703.	pbz+oh=pbzjB+h2o	7.08E+06	1.9	-159.0
4704.	pbz+oh=pbzjC+h2o	2.65E+12	0.0	0.0
4705.	pbz+ho2=pbzjA+h2o2	4.76E+04	2.5	16494.0
4706.	pbz+ho2=pbzjB+h2o2	9.64E+03	2.6	13910.0
4707.	pbz+ho2=pbzjC+h2o2	9.64E+03	2.6	12910.0
4708.	pbz+ch3=pbzjA+ch4	2.75E-01	3.6	7150.0
4709.	pbz+ch3=pbzjB+ch4	6.00E+11	0.0	10120.0
4710.	pbz+ch3=pbzjC+ch4	6.00E+11	0.0	10120.0
4711.	pbz+c2h3=pbzjA+c2h4	6.00E+02	3.3	10502.0
4712.	pbz+c2h3=pbzjB+c2h4	1.00E+03	3.1	8829.0
4713.	pbz+c2h3=pbzjC+c2h4	1.00E+03	3.1	8829.0
4714.	pbz+c2h5=pbzjA+c2h6	3.16E+11	0.0	12300.0
4715.	pbz+c2h5=pbzjB+c2h6	5.01E+10	0.0	10400.0
4716.	pbz+c2h5=pbzjC+c2h6	5.01E+10	0.0	10400.0
4717.	pbz+ac3h5=pbzjA+c3h6	7.94E+11	0.0	20500.0
4718.	pbz+ac3h5=pbzjB+c3h6	7.94E+11	0.0	16200.0
4719.	pbz+ac3h5=pbzjC+c3h6	7.94E+11	0.0	16200.0
4720.	pbz+tc3h5=pbzjA+c3h6	7.94E+11	0.0	20500.0
4721.	pbz+tc3h5=pbzjB+c3h6	7.94E+11	0.0	16200.0
4722.	pbz+tc3h5=pbzjC+c3h6	7.94E+11	0.0	16200.0
4723.	pbz+sc3h5=pbzjA+c3h6	7.94E+11	0.0	20500.0
4724.	pbz+sc3h5=pbzjB+c3h6	7.94E+11	0.0	16200.0
4725.	pbz+sc3h5=pbzjC+c3h6	7.94E+11	0.0	16200.0
4726.	pbz+c6h5=pbzjA+c6h6	7.94E+11	0.0	20500.0
4727.	pbz+c6h5=pbzjB+c6h6	7.94E+11	0.0	16200.0
4728.	pbz+c6h5=pbzjC+c6h6	7.94E+11	0.0	16200.0
4729.	pbz+phch2=pbzjA+toluen	7.94E+11	0.0	20500.0
4730.	pbz+phch2=pbzjB+toluen	7.94E+11	0.0	16200.0
4731.	pbz+phch2=pbzjC+toluen	7.94E+11	0.0	16200.0
4732.	pbz+Bphc2h4=pbzjA+phc2h5	7.94E+11	0.0	2050.0
4733.	pbz+Bphc2h4=pbzjB+phc2h5	7.94E+11	0.0	1620.0
4734.	pbz+Bphc2h4=pbzjC+phc2h5	7.94E+11	0.0	1620.0
4735.	pbz+ch3o=pbzjA+ch3oh	3.18E+11	0.0	7050.0
4736.	pbz+ch3o=pbzjB+ch3oh	7.20E+10	0.0	4470.0
4737.	pbz+ch3o=pbzjC+ch3oh	7.20E+10	0.0	4470.0
4738.	pbzjB=BPHPROPY	2.00E+11	0.0	20000.0
4739.	pbzjA=phch2+c2h4	2.00E+13	0.0	12836.0
4740.	pbzjB=c6h5+c3h6	2.00E+13	0.0	35390.0
4741.	pbzjC=styren+ch3	1.00E+14	0.0	34860.0
4742.	BPHPROPY=styren+ch3	1.00E+14	0.0	24000.0
4743.	pbzjB+O=phch2+ch3hco	1.60E+13	0.0	0.0
4744.	pbzjB+oh=toluen+ch3hco	1.60E+13	0.0	0.0
4745.	pbzjB+ho2=>phch2+ch3hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
4746.	pbzjC+O=phhco+c2h5	1.60E+13	0.0	0.0
4747.	pbzjC+oh=phhco+c2h6	1.60E+13	0.0	0.0
4748.	pbzjC+ho2=>phhco+c2h5+oh	5.00E+12	0.0	0.0
4749.	phc3h5-1=phch2+c2h3	8.00E+15	0.0	88500.0
4750.	phc3h5-1=phc3h4+H	1.40E+15	0.0	86250.0
4751.	phc3h5-1+H=phc3h4+H2	2.63E+14	0.0	8820.0
4752.	phc3h5-1+O=phc3h4+oh	4.00E+11	0.7	-2100.0
4753.	phc3h5-1+oh=phc3h4+h2o	3.12E+06	2.0	-1300.0
4754.	phc3h5-1+ho2=phc3h4+h2o2	2.66E+11	0.0	11270.0
4755.	phc3h5-1+o2=phc3h4+ho2	1.95E+12	0.0	38000.0
4756.	phc3h5-1+ch3=phc3h4+ch4	1.90E+12	0.0	9010.0
4757.	phc3h5-1+c6h5=phc3h4+c6h6	2.80E+12	0.0	11220.0
4758.	phc3h5-1+phch2=phc3h4+toluen	2.80E+12	0.0	11220.0
4759.	phc3h5-1+Aphc2h4=phc3h4+phc2h5	2.80E+12	0.0	11220.0
4760.	phc3h5-1+H=c6h6+ac3h5	2.40E+13	0.0	5123.0
4761.	phc3h5-1+ho2=>Aphc2h4+hco+oh	2.50E+12	1.0	25000.0
4762.	phc3h5-1+ho2=>phch2co+ch3+oh	2.50E+12	1.0	25000.0
4763.	phc3h5-1+O=styren+ch2o	7.02E+07	1.6	-1628.0
4764.	phc3h5-1+O=phhco+c2h4	4.69E+07	1.6	-1628.0
4765.	phc3h5-1+oh=>Aphc2h4+ch2o	1.00E+12	0.0	0.0
4766.	phc3h5-1+oh=>phch2hco+ch3	1.00E+12	0.0	0.0
4767.	phc3h5-2=ASTYRYL+ch3	3.00E+17	0.0	99000.0
4768.	phc3h5-2=c6h5+sc3h5	8.00E+15	0.0	163800.0
4769.	phc3h5-2=phc3h4+H	2.10E+15	0.0	88230.0
4770.	phc3h5-2+H=phc3h4+H2	5.00E+13	0.0	3900.0
4771.	phc3h5-2+O=phc3h4+oh	1.75E+11	0.7	5884.0
4772.	phc3h5-2+oh=phc3h4+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
4773.	phc3h5-2+ho2=phc3h4+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
4774.	phc3h5-2+o2=phc3h4+ho2	1.95E+12	0.0	39000.0
4775.	phc3h5-2+ch3=phc3h4+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4776.	phc3h5-2+c6h5=phc3h4+c6h6	2.80E+12	0.0	11220.0
4777.	phc3h5-2+phch2=phc3h4+toluen	2.80E+12	0.0	11220.0
4778.	phc3h5-2+Aphc2h4=phc3h4+phc2h5	2.80E+12	0.0	11220.0
4779.	phc3h5-2+O=phhco+c2h4	7.00E+07	1.6	-628.0
4780.	phc3h5-2+O=styren+ch2o	4.70E+07	1.6	-628.0
4781.	phc3h5-2+oh=>phhco+c2h5	2.60E+13	0.0	0.0
4782.	phc3h5-2+oh=>phch2+ch3hco	2.60E+13	0.0	0.0
4783.	phc3h5-2+oh=Cphc3h5ohB	4.75E+12	0.0	-782.0
4784.	phc3h5-2+oh=Bphc3h5ohC	4.75E+12	0.0	-782.0
4785.	phc3h4+ho2=Cophc3h4-1+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
4786.	phc3h4+ho2=Aophc3h4-2+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
4787.	phc3h4+ch3o2=Cophc3h4-1+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
4788.	phc3h4+ch3o2=Aophc3h4-2+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
4789.	phc3h4+c2h5o2=Cophc3h4-1+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
4790.	phc3h4+c2h5o2=Aophc3h4-2+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
4791.	phc3h4+nc3h7o2=Cophc3h4-1+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
4792.	phc3h4+nc3h7o2=Aophc3h4-2+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
4793.	phc3h4+ic3h7o2=Cophc3h4-1+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
4794.	phc3h4+ic3h7o2=Aophc3h4-2+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
4795.	phc3h4+o2=phhco+ch2hco	1.06E+10	0.3	12838.0
4796.	Cophc3h4-1=phhco+c2h3	7.94E+14	0.0	19000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

4797.	Aophc3h4-2=ch2o+ASTYRYL	7.94E+14	0.0	19000.0
4798.	Cphc3h5ohB+o2=pbzohBqjC	4.58E+11	0.0	-378.0
4799.	Bphc3h5ohC+o2=pbzohCqjB	2.00E+12	0.0	0.0
4800.	Bphc3h5ohA+o2=pbzohAqjB	2.00E+12	0.0	0.0
4801.	Aphc3h5ohB+o2=pbzohBqjA	2.00E+12	0.0	0.0
4802.	pbzohBqjC=phhco+ch3hco+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
4803.	pbzohCqjB=phhco+ch3hco+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
4804.	pbzohAqjB=phch2hco+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
4805.	pbzohBqjA=phch2hco+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
4806.	phc2h4hco+o2=>phc2h4co+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0
4807.	phc2h4hco+ho2=>phc2h4co+h2o2	1.70E+12	0.0	10700.0
4808.	phc2h4hco+oh=>phc2h4co+h2o	2.35E+10	0.7	-1113.0
4809.	phc2h4hco+O=>phc2h4co+oh	5.85E+12	0.0	1808.0
4810.	phc2h4hco+H=>phc2h4co+H2	5.54E+02	3.5	5167.0
4811.	phc2h4hco+ch3=>phc2h4co+ch4	2.25E+00	4.0	8285.0
4812.	phc2h4hco=>Aphc2h4+hco	5.00E+16	0.0	72250.0
4813.	phc2h4co=Aphc2h4+co	8.00E+13	0.0	30000.0
4814.	phc2h4co+ho2=>Aphc2h4+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
4815.	phch2coch2=phch2+ch2co	4.00E+13	0.0	13500.0
4816.	phcoc2h4=phco+c2h4	4.00E+13	0.0	27870.0
4817.	phcoc2h4+o2=phcoc2h3+ho2	5.00E+12	0.0	5000.0
4818.	phcoc2h3=>phco+c2h3	1.22E+23	-2.0	83950.0
4819.	phcoc2h3=>c6h5+c2h3co	1.22E+23	-2.0	83950.0
4820.	phch2+phch2=c14h14	2.51E+11	0.4	0.0
4821.	c5h5+c5h5=NAPHT+H2	1.00E+13	0.0	7000.0
4822.	c5h5+c5h5=NAPHT+H+H	2.00E+13	0.0	4000.0
4823.	A1c2h3AC=NAPHT+H	1.00E+10	0.0	4780.1
4824.	phch2+c3h3=c10h10	1.00E+10	0.0	0.0
4825.	NAPHT+H=c10h9	5.00E+14	0.0	5000.0
4826.	NAPHT=A2-X+H	4.50E+15	0.0	107433.1
4827.	NAPHT+H=A2-X+H2	2.50E+14	0.0	15999.0
4828.	NAPHT+oh=A2-X+h2o	1.63E+08	1.4	1450.8
4829.	NAPHT+ch3=A2-X+ch4	2.00E+12	0.0	15060.0
4830.	NAPHT+O=A2O+H	2.23E+13	0.0	4530.7
4831.	NAPHT+O=A2-X+oh	2.00E+13	0.0	14704.0
4832.	NAPHT+o2=A2-X+ho2	6.30E+13	0.0	60000.0
4833.	A2-X+ho2=A2O+oh	5.00E+13	0.0	999.0
4834.	A2-X+o2=A2O+O	2.09E+12	0.0	7468.9
4835.	A2-X+oh=A2O+H	5.00E+13	0.0	0.0
4836.	A2O+H=A2oh	5.06E+14	0.0	0.0
4837.	A2O=>INDENYL+co	7.40E+11	0.0	43853.0
4838.	A2oh+oh=A2O+h2o	3.00E+13	0.0	0.0
4839.	A2oh+H=A2O+H2	1.15E+14	0.0	12399.6
4840.	A2oh+H=NAPHT+oh	2.23E+13	0.0	7927.8
4841.	A2oh+O=A2O+oh	1.26E+13	0.0	2899.1
4842.	c10h10+oh=c10h9+h2o	5.00E+06	2.0	0.0
4843.	c10h10+O=c10h9+oh	7.00E+11	0.7	6000.0
4844.	c10h10+H=c10h9+H2	2.00E+05	2.5	2500.0
4845.	c10h9+H=c10h10	1.00E+14	0.0	0.0
4846.	c6h4c2h3+c2h2=A1c2h3AC	5.00E+12	0.0	0.0
4847.	pch=c2h5+mchA	6.50E+16	0.0	84000.0
4848.	pch=ch3+echA	6.50E+16	0.0	85000.0
4849.	pch=nc3h7+cyc6h11	6.50E+16	0.0	84000.0
4850.	pch=>c2h4+c2h4+c5h10	1.30E+17	0.0	84000.0
4851.	pch=>c2h4+nc3h7+Dc4h7-1	1.30E+17	0.0	84000.0
4852.	pch=>3c2h4+c3h6	1.30E+17	0.0	84000.0
4853.	pch=pchA+H	9.00E+15	0.0	100220.0
4854.	pch=pchB+H	6.00E+15	0.0	99120.0
4855.	pch=pchC+H	6.00E+15	0.0	99120.0
4856.	pch=pchD+H	3.00E+15	0.0	99520.0
4857.	pch=pchE+H	6.00E+15	0.0	99520.0
4858.	pch=pchF+H	6.00E+15	0.0	99520.0
4859.	pch=pchG+H	6.00E+15	0.0	99520.0
4860.	pch+o2=pchA+ho2	2.10E+13	0.0	50610.0
4861.	pch+o2=pchB+ho2	1.40E+13	0.0	49510.0
4862.	pch+o2=pchC+ho2	1.40E+13	0.0	49510.0
4863.	pch+o2=pchD+ho2	7.00E+11	0.0	49910.0
4864.	pch+o2=pchE+ho2	1.40E+13	0.0	49910.0
4865.	pch+o2=pchF+ho2	1.40E+13	0.0	49910.0
4866.	pch+o2=pchG+ho2	1.40E+13	0.0	49910.0
4867.	pch+oh=pchA+h2o	3.16E+07	1.8	934.0
4868.	pch+oh=pchB+h2o	3.00E+09	1.0	260.0
4869.	pch+oh=pchC+h2o	3.00E+09	1.0	260.0
4870.	pch+oh=pchD+h2o	5.50E+12	0.0	790.0
4871.	pch+oh=pchE+h2o	1.10E+13	0.0	790.0
4872.	pch+oh=pchF+h2o	1.10E+13	0.0	790.0
4873.	pch+oh=pchG+h2o	5.50E+12	0.0	790.0
4874.	pch+ho2=pchA+h2o2	2.38E+04	2.5	16494.0
4875.	pch+ho2=pchB+h2o2	9.64E+03	2.6	13910.0
4876.	pch+ho2=pchC+h2o2	9.64E+03	2.6	13910.0
4877.	pch+ho2=pchD+h2o2	3.61E+03	2.5	10532.0
4878.	pch+ho2=pchE+h2o2	1.93E+04	2.6	13910.0
4879.	pch+ho2=pchF+h2o2	1.93E+04	2.6	13910.0
4880.	pch+ho2=pchG+h2o2	9.64E+03	2.6	13910.0
4881.	pch+H=pchA+H2	6.68E+05	2.5	6756.0
4882.	pch+H=pchB+H2	1.30E+06	2.4	4471.0
4883.	pch+H=pchC+H2	1.30E+06	2.4	4471.0
4884.	pch+H=pchD+H2	6.02E+05	2.4	2583.0
4885.	pch+H=pchE+H2	2.60E+06	2.4	4471.0
4886.	pch+H=pchF+H2	2.60E+06	2.4	4471.0
4887.	pch+H=pchG+H2	1.30E+06	2.4	4471.0
4888.	pch+O=pchA+oh	1.87E+06	2.4	5505.0
4889.	pch+O=pchB+oh	5.49E+05	2.5	3140.0
4890.	pch+O=pchC+oh	5.49E+05	2.5	3140.0
4891.	pch+O=pchD+oh	3.83E+05	2.4	1140.0
4892.	pch+O=pchE+oh	1.10E+06	2.5	2830.0
4893.	pch+O=pchF+oh	1.10E+06	2.5	2830.0
4894.	pch+O=pchG+oh	5.51E+05	2.5	2830.0
4895.	pch+ch3=pchA+ch4	1.50E+12	0.0	11710.0
4896.	pch+ch3=pchB+ch4	8.07E+11	0.0	10110.0
4897.	pch+ch3=pchC+ch4	8.07E+11	0.0	10110.0
4898.	pch+ch3=pchD+ch4	6.01E-10	6.4	893.0
4899.	pch+ch3=pchE+ch4	3.02E+00	3.5	5481.0
4900.	pch+ch3=pchF+ch4	3.02E+00	3.5	5481.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

4901.	pch+ch3=pchG+ch4	1.51E+00	3.5	5481.0
4902.	pch+c2h5=pchA+c2h6	4.52E-01	3.6	9141.0
4903.	pch+c2h5=pchB+c2h6	1.21E+00	3.5	7472.0
4904.	pch+c2h5=pchC+c2h6	1.21E+00	3.5	7472.0
4905.	pch+c2h5=pchD+c2h6	6.01E-10	6.4	893.0
4906.	pch+c2h5=pchE+c2h6	3.02E+00	3.5	5481.0
4907.	pch+c2h5=pchF+c2h6	3.02E+00	3.5	5481.0
4908.	pch+c2h5=pchG+c2h6	1.51E+00	3.5	5481.0
4909.	pch+c2h3=pchA+c2h4	3.00E+02	3.3	10502.0
4910.	pch+c2h3=pchB+c2h4	1.00E+03	3.1	8829.0
4911.	pch+c2h3=pchC+c2h4	1.00E+03	3.1	8829.0
4912.	pch+c2h3=pchD+c2h4	6.01E-10	6.4	893.0
4913.	pch+c2h3=pchE+c2h4	3.02E+00	3.5	5481.0
4914.	pch+c2h3=pchF+c2h4	3.02E+00	3.5	5481.0
4915.	pch+c2h3=pchG+c2h4	1.51E+00	3.5	5481.0
4916.	pch+ac3h5=pchA+c3h6	2.17E+02	3.3	19852.0
4917.	pch+ac3h5=pchB+c3h6	7.87E+01	3.3	18163.0
4918.	pch+ac3h5=pchC+c3h6	7.87E+01	3.3	18163.0
4919.	pch+ac3h5=pchD+c3h6	6.01E-10	6.4	893.0
4920.	pch+ac3h5=pchE+c3h6	3.02E+00	3.5	5481.0
4921.	pch+ac3h5=pchF+c3h6	3.02E+00	3.5	5481.0
4922.	pch+ac3h5=pchG+c3h6	1.51E+00	3.5	5481.0
4923.	pch+sc3h5=pchA+c3h6	2.17E+02	3.3	19852.0
4924.	pch+sc3h5=pchB+c3h6	7.87E+01	3.3	18163.0
4925.	pch+sc3h5=pchC+c3h6	7.87E+01	3.3	18163.0
4926.	pch+sc3h5=pchD+c3h6	6.01E-10	6.4	893.0
4927.	pch+sc3h5=pchE+c3h6	3.02E+00	3.5	5481.0
4928.	pch+sc3h5=pchF+c3h6	3.02E+00	3.5	5481.0
4929.	pch+sc3h5=pchG+c3h6	1.51E+00	3.5	5481.0
4930.	pch+tc3h5=pchA+c3h6	2.17E+02	3.3	19852.0
4931.	pch+tc3h5=pchB+c3h6	7.87E+01	3.3	18163.0
4932.	pch+tc3h5=pchC+c3h6	7.87E+01	3.3	18163.0
4933.	pch+tc3h5=pchD+c3h6	6.01E-10	6.4	893.0
4934.	pch+tc3h5=pchE+c3h6	3.02E+00	3.5	5481.0
4935.	pch+tc3h5=pchF+c3h6	3.02E+00	3.5	5481.0
4936.	pch+tc3h5=pchG+c3h6	1.51E+00	3.5	5481.0
4937.	pch+hco=pchA+ch2o	1.02E+05	2.5	18441.0
4938.	pch+hco=pchB+ch2o	1.08E+07	1.9	17010.0
4939.	pch+hco=pchC+ch2o	1.08E+07	1.9	17010.0
4940.	pch+hco=pchD+ch2o	2.25E+11	0.0	9540.0
4941.	pch+hco=pchE+ch2o	4.50E+11	0.0	9540.0
4942.	pch+hco=pchF+ch2o	4.50E+11	0.0	9540.0
4943.	pch+hco=pchG+ch2o	2.25E+11	0.0	9540.0
4944.	pch+ch3o=pchA+ch3oh	1.59E+11	0.0	7050.0
4945.	pch+ch3o=pchB+ch3oh	7.20E+10	0.0	4470.0
4946.	pch+ch3o=pchC+ch3oh	7.20E+10	0.0	4470.0
4947.	pch+ch3o=pchD+ch3oh	2.29E+10	0.0	2873.0
4948.	pch+ch3o=pchE+ch3oh	2.90E+11	0.0	4571.0
4949.	pch+ch3o=pchF+ch3oh	2.90E+11	0.0	4571.0
4950.	pch+ch3o=pchG+ch3oh	1.45E+11	0.0	4571.0
4951.	pch+Dc4h7-1=pchA+c4h8	4.52E-01	3.6	9141.0
4952.	pch+Dc4h7-1=pchB+c4h8	1.21E+00	3.5	7472.0
4953.	pch+Dc4h7-1=pchC+c4h8	1.21E+00	3.5	7472.0
4954.	pch+Dc4h7-1=pchD+c4h8	6.01E-10	6.4	893.0
4955.	pch+Dc4h7-1=pchE+c4h8	3.02E+00	3.5	5481.0
4956.	pch+Dc4h7-1=pchF+c4h8	3.02E+00	3.5	5481.0
4957.	pch+Dc4h7-1=pchG+c4h8	1.51E+00	3.5	5481.0
4958.	pchA=mchA+c2h4	2.00E+13	0.0	42000.0
4959.	pchB=cyc6h11+c3h6	2.00E+13	0.0	42000.0
4960.	pchC=eche1+ch3	2.00E+13	0.0	45000.0
4961.	pchC=>c2h4+c2h4+Cc5h9-1	2.00E+13	0.0	42000.0
4962.	pchD=c2h5+mche1	2.00E+13	0.0	42000.0
4963.	pchE=cyc6h10+nc3h7	5.00E+12	0.0	39500.0
4964.	pchD=>c2h4+P2c4h614	2.00E+13	0.0	45000.0
4965.	pchE=>c2h4+c4h6+nc3h7	2.00E+13	0.0	44000.0
4966.	pchF=>c5h10+Dc4h7-1	1.00E+13	0.0	50000.0
4967.	pchF=>c2h5+c7h12-16	2.00E+13	0.0	45000.0
4968.	pchF=>c2h4+Dc7h13-1	2.00E+13	0.0	45000.0
4969.	pchG=>c5h10+Dc4h7-1	2.00E+13	0.0	50000.0
4970.	pchG=>nc3h7+c6h10-15	2.00E+13	0.0	45000.0
4971.	pchA=pche1+H	2.40E+13	0.0	36450.0
4972.	pchB=pche1+H	3.60E+13	0.0	36050.0
4973.	pchB=pche2+H	2.40E+13	0.0	33250.0
4974.	pchC=pche2+H	2.40E+13	0.0	33250.0
4975.	pchC=pche3+H	1.20E+13	0.0	30370.0
4976.	pchD=pche3+H	2.40E+13	0.0	29970.0
4977.	pchD=pche4+H	4.80E+13	0.0	31690.0
4978.	pchE=pche4+H	1.20E+13	0.0	31690.0
4979.	pchE=pche5+H	2.40E+13	0.0	32625.0
4980.	pchF=pche5+H	2.40E+13	0.0	32625.0
4981.	pchF=pche6+H	2.40E+13	0.0	32965.0
4982.	pchG=pche6+H	4.80E+13	0.0	32965.0
4983.	pchA+o2=pche1+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
4984.	pchB+o2=pche1+ho2	2.85E+12	0.0	5000.0
4985.	pchB+o2=pche2+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
4986.	pchC+o2=pche2+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
4987.	pchC+o2=pche3+ho2	9.50E+11	0.0	5000.0
4988.	pchD+o2=pche3+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
4989.	pchD+o2=pche4+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
4990.	pchE+o2=pche4+ho2	9.50E+11	0.0	5000.0
4991.	pchE+o2=pche5+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
4992.	pchF+o2=pche5+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
4993.	pchF+o2=pche6+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
4994.	pchG+o2=pche6+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
4995.	pchA+O=ch2o+echA	2.00E+13	0.0	4000.0
4996.	pchB+O=ch3hco+mchA	2.00E+13	0.0	4000.0
4997.	pchB+O=ch3+echoA	2.00E+13	0.0	4000.0
4998.	pchC+O=ethco+cyc6h11	2.00E+13	0.0	4000.0
4999.	pchC+O=c2h5+mchoA	2.00E+13	0.0	4000.0
5000.	pchD+O=nc3h7+chxone	2.00E+13	0.0	4000.0
5001.	pchE+O=>c5h10+c2h4+ch2hco	2.00E+13	0.0	4000.0
5002.	pchE+O=>2c2h4+c2h5+acrol	2.00E+13	0.0	4000.0
5003.	pchF+O=>c5h10+c2h4+ch2hco	2.00E+13	0.0	4000.0
5004.	pchF+O=>ac3h5hco+c2h4+nc3h7	2.00E+13	0.0	4000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

5005.	pchG+O=>c5h10+c2h4+ch2hco	2.00E+13	0.0	4000.0
5006.	pchA+oh=ch2o+ech	2.00E+13	0.0	4000.0
5007.	pchB+oh=ch3hco+mch	2.00E+13	0.0	4000.0
5008.	pchB+oh=ch4+echoA	2.00E+13	0.0	4000.0
5009.	pchC+oh=ethco+cyc6h12	2.00E+13	0.0	4000.0
5010.	pchC+oh=c2h6+mchoA	2.00E+13	0.0	4000.0
5011.	pchD+oh=c3h8+chxone	2.00E+13	0.0	4000.0
5012.	pchE+oh=>c5h10+c2h4+ch3hco	2.00E+13	0.0	4000.0
5013.	pchE+oh=>2c2h4+c2h6+acrol	2.00E+13	0.0	4000.0
5014.	pchF+oh=>c5h10+c2h4+ch3hco	2.00E+13	0.0	4000.0
5015.	pchF+oh=>ac3h5hco+c2h4+c3h8	2.00E+13	0.0	4000.0
5016.	pchG+oh=>c5h10+c2h4+ch3hco	2.00E+13	0.0	4000.0
5017.	pchA+ho2=>ch2o+echA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5018.	pchB+ho2=>ch3hco+mchA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5019.	pchB+ho2=>ch3+echoA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5020.	pchC+ho2=>ethco+cyc6h11+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5021.	pchC+ho2=>c2h5+mchoA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5022.	pchD+ho2=>nc3h7+chxone+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5023.	pchE+ho2=>c5h10+c2h4+ch2hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5024.	pchE+ho2=>2c2h4+c2h5+acrol+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5025.	pchF+ho2=>c5h10+c2h4+ch2hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5026.	pchF+ho2=>ac3h5hco+c2h4+nc3h7+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5027.	pchG+ho2=>c5h10+c2h4+ch2hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5028.	pchE=pchB	4.00E+11	0.0	16100.0
5029.	pchG=pchB	2.00E+11	0.0	18100.0
5030.	pchD=pchA	6.20E+09	0.6	26190.0
5031.	pchE=pchA	4.00E+11	0.0	11100.0
5032.	pchF=pchA	4.00E+11	0.0	18100.0
5033.	pchF=pchC	4.00E+11	0.0	18100.0
5034.	pchG=pchC	4.00E+11	0.0	11100.0
5035.	pchA+o2=pchqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
5036.	pchB+o2=pchqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
5037.	pchC+o2=pchqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
5038.	pchD+o2=pchqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
5039.	pchE+o2=pchqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
5040.	pchF+o2=pchqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
5041.	pchG+o2=pchqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
5042.	pchA+ho2=pchojA+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
5043.	pchB+ho2=pchojB+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
5044.	pchC+ho2=pchojC+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
5045.	pchD+ho2=pchojD+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
5046.	pchE+ho2=pchojE+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
5047.	pchF+ho2=pchojF+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
5048.	pchG+ho2=pchojG+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
5049.	pchA+ch3o2=pchojA+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5050.	pchB+ch3o2=pchojB+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5051.	pchC+ch3o2=pchojC+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5052.	pchD+ch3o2=pchojD+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5053.	pchE+ch3o2=pchojE+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5054.	pchF+ch3o2=pchojF+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5055.	pchG+ch3o2=pchojG+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5056.	pchA+c2h5o2=pchojA+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5057.	pchB+c2h5o2=pchojB+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5058.	pchC+c2h5o2=pchojC+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5059.	pchD+c2h5o2=pchojD+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5060.	pchE+c2h5o2=pchojE+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5061.	pchF+c2h5o2=pchojF+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5062.	pchG+c2h5o2=pchojG+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5063.	pchA+nc3h7o2=pchojA+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5064.	pchB+nc3h7o2=pchojB+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5065.	pchC+nc3h7o2=pchojC+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5066.	pchD+nc3h7o2=pchojD+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5067.	pchE+nc3h7o2=pchojE+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5068.	pchF+nc3h7o2=pchojF+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5069.	pchG+nc3h7o2=pchojG+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5070.	pchA+pchqjA=2pchojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
5071.	pchB+pchqjA=pchojB+pchojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
5072.	pchC+pchqjA=pchojC+pchojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
5073.	pchD+pchqjA=pchojD+pchojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
5074.	pchE+pchqjA=pchojE+pchojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
5075.	pchF+pchqjA=pchojF+pchojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
5076.	pchG+pchqjA=pchojG+pchojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
5077.	pchA+pchqjB=pchojA+pchojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
5078.	pchB+pchqjB=2pchojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
5079.	pchC+pchqjB=pchojC+pchojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
5080.	pchD+pchqjB=pchojD+pchojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
5081.	pchE+pchqjB=pchojE+pchojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
5082.	pchF+pchqjB=pchojF+pchojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
5083.	pchG+pchqjB=pchojG+pchojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
5084.	pchA+pchqjC=pchojA+pchojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
5085.	pchB+pchqjC=pchojB+pchojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
5086.	pchC+pchqjC=2pchojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
5087.	pchD+pchqjC=pchojD+pchojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
5088.	pchE+pchqjC=pchojE+pchojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
5089.	pchF+pchqjC=pchojF+pchojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
5090.	pchG+pchqjC=pchojG+pchojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
5091.	pchA+pchqjD=pchojA+pchojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
5092.	pchB+pchqjD=pchojB+pchojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
5093.	pchC+pchqjD=pchojC+pchojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
5094.	pchD+pchqjD=2pchojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
5095.	pchE+pchqjD=pchojE+pchojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
5096.	pchF+pchqjD=pchojF+pchojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
5097.	pchG+pchqjD=pchojG+pchojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
5098.	pchA+pchqjE=pchojA+pchojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
5099.	pchB+pchqjE=pchojB+pchojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
5100.	pchC+pchqjE=pchojC+pchojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
5101.	pchD+pchqjE=pchojD+pchojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
5102.	pchE+pchqjE=2pchojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
5103.	pchF+pchqjE=pchojF+pchojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
5104.	pchG+pchqjE=pchojG+pchojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
5105.	pchA+pchqjF=pchojA+pchojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
5106.	pchB+pchqjF=pchojB+pchojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
5107.	pchC+pchqjF=pchojC+pchojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
5108.	pchD+pchqjF=pchojD+pchojF	7.00E+12	0.0	-1000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

5109.	pchE+pchqjF=pchojE+pchojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
5110.	pchF+pchqjF=2pchojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
5111.	pchG+pchqjF=pchojG+pchojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
5112.	pchA+pchqjG=pchojA+pchojG	7.00E+12	0.0	-1000.0
5113.	pchB+pchqjG=pchojB+pchojG	7.00E+12	0.0	-1000.0
5114.	pchC+pchqjG=pchojC+pchojG	7.00E+12	0.0	-1000.0
5115.	pchD+pchqjG=pchojD+pchojG	7.00E+12	0.0	-1000.0
5116.	pchE+pchqjG=pchojE+pchojG	7.00E+12	0.0	-1000.0
5117.	pchF+pchqjG=pchojF+pchojG	7.00E+12	0.0	-1000.0
5118.	pchG+pchqjG=2pchojG	7.00E+12	0.0	-1000.0
5119.	pchojA=ch2o+echA	1.00E+15	0.0	21600.0
5120.	pchojB=ch3hco+mchA	7.94E+14	0.0	15300.0
5121.	pchojB=ch3+echoA	7.94E+14	0.0	15300.0
5122.	pchojC=ethco+cyc6h11	7.94E+14	0.0	15300.0
5123.	pchojC=c2h5+mchoA	7.94E+14	0.0	15300.0
5124.	pchojD=nc3h7+chxone	7.94E+14	0.0	15300.0
5125.	pchojG=EtDc7oArI	7.94E+14	0.0	15300.0
5126.	pchojF=EtDc7oIrA	7.94E+14	0.0	15300.0
5127.	pchojF=MeEc8oArI	7.94E+14	0.0	15300.0
5128.	pchojE=MeEc8oIrA	7.94E+14	0.0	15300.0
5129.	pchojE=Fc9oA	7.94E+14	0.0	15300.0
5130.	EtDc7oArI=c2h4+ch2hco+c5h10	2.00E+13	0.0	27750.0
5131.	EtDc7oArI=c2h4+c2h5+c4h7hco-1	2.00E+13	0.0	27750.0
5132.	EtDc7oArI+o2=EtDc7oAqjI	4.82E+36	-8.2	5167.0
5133.	EtDc7oAqjI=DEtDc7oAqI	2.87E+08	1.0	22000.0
5134.	DEtDc7oAqI+o2=EtDc7oAqIqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
5135.	EtDc7oAqIqjD=oh+EtDc7oAoIqD	2.87E+08	1.0	26000.0
5136.	EtDc7oAoIqD=oh+c6oAoC+ch2ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
5137.	EtDc7oAoIqD=oh+c7oAoD+ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
5138.	EtDc7oIrA=c2h4+ch2hco+c5h10	2.00E+13	0.0	28140.0
5139.	EtDc7oIrA=c2h4+nc3h7+ac3h5hco	2.00E+13	0.0	36400.0
5140.	EtDc7oIrA+o2=EtDc7oIqjA	1.84E+45	-11.1	6538.0
5141.	EtDc7oIqjA=CEtDc7oIqA	5.75E+08	1.0	25000.0
5142.	EtDc7oIqjA=DEtDc7oIqA	4.94E+07	1.0	19000.0
5143.	CEtDc7oIqA+o2=EtDc7oIqAqjC	4.82E+36	-8.2	5167.0
5144.	DEtDc7oIqA+o2=EtDc7oIqAqjD	4.82E+36	-8.2	5167.0
5145.	EtDc7oIqAqjC=oh+EtDc7oAoIqC	5.75E+08	1.0	26000.0
5146.	EtDc7oIqAqjD=oh+EtDc7oAoIqD	9.89E+07	1.0	23000.0
5147.	EtDc7oAoIqC=oh+hcoch2hco+Cc6oA	1.00E+16	0.0	43000.0
5148.	EtDc7oAoIqC=oh+ch2hco+MeCc6oAoG	1.00E+16	0.0	43000.0
5149.	MeEc8oArI=ch2ch2ch2hco+c5h10	2.00E+13	0.0	29200.0
5150.	MeEc8oArI=c6e5oA+nc3h7	2.00E+13	0.0	33750.0
5151.	MeEc8oArI+o2=MeEc8oAqjI	1.84E+45	-11.1	6538.0
5152.	MeEc8oAqjI=DMeEc8oAqI	5.75E+08	1.0	25000.0
5153.	MeEc8oAqjI=FMeEc8oAqI	5.75E+08	1.0	25000.0
5154.	DMeEc8oAqI+o2=MeEc8oAqIqjD	4.82E+36	-8.2	5167.0
5155.	FMeEc8oAqI+o2=MeEc8oAqIqjF	4.82E+36	-8.2	5167.0
5156.	MeEc8oAqIqjD=oh+MeEc8oAoIqD	5.75E+08	1.0	26000.0
5157.	MeEc8oAqIqjF=oh+MeEc8oAoIqF	5.75E+08	1.0	26000.0
5158.	MeEc8oAoIqD=oh+ch2ch2hco+MeBc5oAoF	1.00E+16	0.0	43000.0
5159.	MeEc8oAoIqD=oh+choch2ch2cho+acrol+c2h5	1.00E+16	0.0	43000.0
5160.	MeEc8oAoIqF=oh+ethco+Bc6oAoF	1.00E+16	0.0	43000.0
5161.	acrol+ch2ch2hco=Bc6oAoF	1.50E+11	0.0	7200.0
5162.	MeCc6oAoG+oh=>h2o+MeCc6oyAoG	4.20E+12	0.0	500.0
5163.	MeCc6oAoG+H=>H2+MeCc6oyAoG	4.00E+13	0.0	4200.0
5164.	MeCc6oAoG+ho2=>h2o2+MeCc6oyAoG	1.00E+12	0.0	10000.0
5165.	MeCc6oyAoG=>co+acrol+nc3h7	2.00E+13	0.0	28700.0
5166.	MeCc6oyAoG+ho2=>oh+co2+acrol+nc3h7	2.00E+13	0.0	0.0
5167.	MeCc6oAoG+oh=>h2o+MeCc6oAoyG	4.20E+12	0.0	500.0
5168.	MeCc6oAoG+H=>H2+MeCc6oAoyG	4.00E+13	0.0	4200.0
5169.	MeCc6oAoG+ho2=>h2o2+MeCc6oAoyG	1.00E+12	0.0	10000.0
5170.	MeCc6oAoyG=>co+Cc6oA	2.00E+13	0.0	28700.0
5171.	MeCc6oAoyG+ho2=>oh+co2+Cc6oA	2.00E+13	0.0	0.0
5172.	MeEc8oIrA=>2c2h4+c2h5+acrol	2.00E+13	0.0	29440.0
5173.	MeEc8oIrA+o2=MeEc8oIqjA	1.84E+45	-11.1	6538.0
5174.	MeEc8oIqjA=CMeEc8oIqA	5.75E+08	1.0	25000.0
5175.	MeEc8oIqjA=DMeEc8oIqA	9.89E+07	1.0	22000.0
5176.	CMeEc8oIqA+o2=MeEc8oIqAqjC	4.82E+36	-8.2	5167.0
5177.	DMeEc8oIqA+o2=MeEc8oIqAqjD	4.82E+36	-8.2	5167.0
5178.	MeEc8oIqAqjC=oh+MeEc8oAoIqC	5.75E+08	1.0	26000.0
5179.	MeEc8oIqAqjD=oh+MeEc8oAoIqD	9.89E+07	1.0	23000.0
5180.	MeEc8oAoIqC=oh+ch2hco+MeCc6oAoG	1.00E+16	0.0	43000.0
5181.	MeEc8oAoIqC=oh+hcoch2hco+MeBc5oArF	1.00E+16	0.0	43000.0
5182.	Fc9oA=c5h10+ch2ch2ch2hco	2.00E+13	0.0	29650.0
5183.	Fc9oA=c2h5+c7e6oA	2.00E+13	0.0	28210.0
5184.	Fc9oA+o2=c9oAqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
5185.	c9oAqjF=Cc9oAqF	9.89E+07	1.0	22000.0
5186.	c9oAqjF=Dc9oAqF	5.75E+08	1.0	25000.0
5187.	c9oAqjF=Hc9oAqF	5.75E+08	1.0	25000.0
5188.	Cc9oAqF+o2=c9oAqFqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
5189.	Dc9oAqF+o2=c9oAqFqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
5190.	Hc9oAqF+o2=c9oAqFqjH	1.84E+45	-11.1	6538.0
5191.	c9oAqFqjC=oh+c9oAoFqC	4.94E+07	1.0	21000.0
5192.	c9oAqFqjD=oh+c9oAoFqD	2.87E+08	1.0	23000.0
5193.	c9oAqFqjH=oh+c9oAoFqH	2.87E+08	1.0	23000.0
5194.	c9oAoFqC=oh+ch2hco+c7oAoD	1.00E+16	0.0	43000.0
5195.	c9oAoFqC=oh+hcoch2hco+Ac6oC	1.00E+16	0.0	43000.0
5196.	c9oAoFqD=oh+choch2ch2cho+Ac5oB	1.00E+16	0.0	43000.0
5197.	c9oAoFqD=oh+ch2ch2hco+c6oAoC	1.00E+16	0.0	43000.0
5198.	c9oAoFqH=oh+ch3hco+Ac7oBoG	1.00E+16	0.0	43000.0
5199.	pchqjA=BpchqA	3.35E+09	1.0	32500.0
5200.	pchqjA=CpchqA	5.75E+08	1.0	23000.0
5201.	pchqjA=DpchqA	4.94E+07	1.0	19000.0
5202.	pchqjB=ApchqB	5.02E+09	1.0	35500.0
5203.	pchqjB=CpchqB	3.35E+09	1.0	32500.0
5204.	pchqjB=DpchqB	2.87E+08	1.0	22000.0
5205.	pchqjB=EpchqB	1.22E+08	1.0	22645.3
5206.	pchqjC=ApchqC	8.62E+08	1.0	28000.0
5207.	pchqjC=BpchqC	3.35E+09	1.0	32500.0
5208.	pchqjC=DpchqC	1.67E+09	1.0	29500.0
5209.	pchqjC=EpchqC	7.13E+08	1.0	25645.3
5210.	pchqjC=FpchqC	7.13E+08	1.0	25226.6
5211.	pchqjD=ApchqD	1.48E+08	1.0	25000.0
5212.	pchqjD=BpchqD	5.75E+08	1.0	25000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

5213.	pchqjD=CpchqD	3.35E+09	1.0	32500.0
5214.	pchqjD=EpchqD	4.15E+09	1.0	33145.3
5215.	pchqjD=FpchqD	4.28E+09	1.0	28226.6
5216.	pchqjD=GpchqD	3.43E+08	1.0	27305.9
5217.	pchqjE=ApchqE	1.58E+07	1.0	24645.3
5218.	pchqjE=BpchqE	6.13E+07	1.0	22645.3
5219.	pchqjE=CpchqE	3.56E+08	1.0	25645.3
5220.	pchqjE=DpchqE	1.04E+09	1.0	30145.3
5221.	pchqjE=FpchqE	2.07E+09	1.0	33145.3
5222.	pchqjE=GpchqE	2.14E+09	1.0	28226.6
5223.	pchqjE=HpchqE	3.43E+08	1.0	27305.9
5224.	pchqjE=IpchqE	2.14E+09	1.0	28226.6
5225.	pchqjF=ApchqF	1.63E+07	1.0	26226.6
5226.	pchqjF=BpchqF	6.32E+07	1.0	24226.6
5227.	pchqjF=CpchqF	3.68E+08	1.0	25226.6
5228.	pchqjF=DpchqF	1.07E+09	1.0	25226.6
5229.	pchqjF=EpchqF	2.07E+09	1.0	33145.3
5230.	pchqjF=GpchqF	2.07E+09	1.0	33145.3
5231.	pchqjF=HpchqF	2.14E+09	1.0	28226.6
5232.	pchqjF=IpchqF	3.43E+08	1.0	27305.9
5233.	pchqjG=DpchqG	1.71E+08	1.0	24305.9
5234.	pchqjG=EpchqG	4.28E+09	1.0	28226.6
5235.	pchqjG=FpchqG	4.15E+09	1.0	33145.3
5236.	pchqjA+ho2=pchqA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
5237.	pchqjB+ho2=pchqB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
5238.	pchqjC+ho2=pchqC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
5239.	pchqjD+ho2=pchqD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
5240.	pchqjE+ho2=pchqE+o2	1.00E+11	0.0	0.0
5241.	pchqjF+ho2=pchqF+o2	1.00E+11	0.0	0.0
5242.	pchqjG+ho2=pchqG+o2	1.00E+11	0.0	0.0
5243.	pchqjA+h2o2=pchqA+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
5244.	pchqjB+h2o2=pchqB+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
5245.	pchqjC+h2o2=pchqC+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
5246.	pchqjD+h2o2=pchqD+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
5247.	pchqjE+h2o2=pchqE+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
5248.	pchqjF+h2o2=pchqF+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
5249.	pchqjG+h2o2=pchqG+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
5250.	pchqjA+H2=pchqA+H	3.01E+13	0.0	26030.0
5251.	pchqjB+H2=pchqB+H	3.01E+13	0.0	26030.0
5252.	pchqjC+H2=pchqC+H	3.01E+13	0.0	26030.0
5253.	pchqjD+H2=pchqD+H	3.01E+13	0.0	26030.0
5254.	pchqjE+H2=pchqE+H	3.01E+13	0.0	26030.0
5255.	pchqjF+H2=pchqF+H	3.01E+13	0.0	26030.0
5256.	pchqjG+H2=pchqG+H	3.01E+13	0.0	26030.0
5257.	pchqjA+ch2o=pchqA+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
5258.	pchqjB+ch2o=pchqB+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
5259.	pchqjC+ch2o=pchqC+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
5260.	pchqjD+ch2o=pchqD+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
5261.	pchqjE+ch2o=pchqE+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
5262.	pchqjF+ch2o=pchqF+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
5263.	pchqjG+ch2o=pchqG+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
5264.	pchqjA+ch3hco=pchqA+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
5265.	pchqjB+ch3hco=pchqB+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
5266.	pchqjC+ch3hco=pchqC+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
5267.	pchqjD+ch3hco=pchqD+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
5268.	pchqjE+ch3hco=pchqE+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
5269.	pchqjF+ch3hco=pchqF+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
5270.	pchqjG+ch3hco=pchqG+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
5271.	pchqjA+c2h6=pchqA+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
5272.	pchqjB+c2h6=pchqB+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
5273.	pchqjC+c2h6=pchqC+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
5274.	pchqjD+c2h6=pchqD+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
5275.	pchqjE+c2h6=pchqE+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
5276.	pchqjF+c2h6=pchqF+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
5277.	pchqjG+c2h6=pchqG+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
5278.	pchqjA+c2h4=pchqA+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
5279.	pchqjB+c2h4=pchqB+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
5280.	pchqjC+c2h4=pchqC+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
5281.	pchqjD+c2h4=pchqD+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
5282.	pchqjE+c2h4=pchqE+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
5283.	pchqjF+c2h4=pchqF+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
5284.	pchqjG+c2h4=pchqG+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
5285.	pchqjA+ethco=pchqA+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
5286.	pchqjB+ethco=pchqB+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
5287.	pchqjC+ethco=pchqC+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
5288.	pchqjD+ethco=pchqD+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
5289.	pchqjE+ethco=pchqE+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
5290.	pchqjF+ethco=pchqF+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
5291.	pchqjG+ethco=pchqG+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
5292.	pchqjA+acrol=pchqA+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
5293.	pchqjB+acrol=pchqB+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
5294.	pchqjC+acrol=pchqC+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
5295.	pchqjD+acrol=pchqD+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
5296.	pchqjE+acrol=pchqE+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
5297.	pchqjF+acrol=pchqF+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
5298.	pchqjG+acrol=pchqG+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
5299.	pchqjA+ch3oh=pchqA+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
5300.	pchqjB+ch3oh=pchqB+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
5301.	pchqjC+ch3oh=pchqC+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
5302.	pchqjD+ch3oh=pchqD+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
5303.	pchqjE+ch3oh=pchqE+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
5304.	pchqjF+ch3oh=pchqF+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
5305.	pchqjG+ch3oh=pchqG+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
5306.	pchqjA+c3h6=pchqA+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
5307.	pchqjB+c3h6=pchqB+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
5308.	pchqjC+c3h6=pchqC+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
5309.	pchqjD+c3h6=pchqD+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
5310.	pchqjE+c3h6=pchqE+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
5311.	pchqjF+c3h6=pchqF+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
5312.	pchqjG+c3h6=pchqG+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
5313.	pchqjA+ch4=pchqA+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0
5314.	pchqjB+ch4=pchqB+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0
5315.	pchqjC+ch4=pchqC+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0
5316.	pchqjD+ch4=pchqD+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

5317.	pchqjE+ch4=pchqE+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0
5318.	pchqjF+ch4=pchqF+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0
5319.	pchqjG+ch4=pchqG+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0
5320.	pchqjA+pch=pchqA+pchA	6.05E+12	0.0	20430.0
5321.	pchqjA+pch=pchqA+pchB	4.03E+12	0.0	17700.0
5322.	pchqjA+pch=pchqA+pchC	4.03E+12	0.0	17700.0
5323.	pchqjA+pch=pchqA+pchD	2.02E+12	0.0	16000.0
5324.	pchqjA+pch=pchqA+pchE	8.06E+12	0.0	17700.0
5325.	pchqjA+pch=pchqA+pchF	8.06E+12	0.0	17700.0
5326.	pchqjA+pch=pchqA+pchG	4.03E+12	0.0	17700.0
5327.	pchqjB+pch=pchqB+pchA	6.05E+12	0.0	20430.0
5328.	pchqjB+pch=pchqB+pchB	4.03E+12	0.0	17700.0
5329.	pchqjB+pch=pchqB+pchC	4.03E+12	0.0	17700.0
5330.	pchqjB+pch=pchqB+pchD	2.02E+12	0.0	16000.0
5331.	pchqjB+pch=pchqB+pchE	8.06E+12	0.0	17700.0
5332.	pchqjB+pch=pchqB+pchF	8.06E+12	0.0	17700.0
5333.	pchqjB+pch=pchqB+pchG	4.03E+12	0.0	17700.0
5334.	pchqjC+pch=pchqC+pchA	6.05E+12	0.0	20430.0
5335.	pchqjC+pch=pchqC+pchB	4.03E+12	0.0	17700.0
5336.	pchqjC+pch=pchqC+pchC	4.03E+12	0.0	17700.0
5337.	pchqjC+pch=pchqC+pchD	2.02E+12	0.0	16000.0
5338.	pchqjC+pch=pchqC+pchE	8.06E+12	0.0	17700.0
5339.	pchqjC+pch=pchqC+pchF	8.06E+12	0.0	17700.0
5340.	pchqjC+pch=pchqC+pchG	4.03E+12	0.0	17700.0
5341.	pchqjD+pch=pchqD+pchA	6.05E+12	0.0	20430.0
5342.	pchqjD+pch=pchqD+pchB	4.03E+12	0.0	17700.0
5343.	pchqjD+pch=pchqD+pchC	4.03E+12	0.0	17700.0
5344.	pchqjD+pch=pchqD+pchD	2.02E+12	0.0	16000.0
5345.	pchqjD+pch=pchqD+pchE	8.06E+12	0.0	17700.0
5346.	pchqjD+pch=pchqD+pchF	8.06E+12	0.0	17700.0
5347.	pchqjD+pch=pchqD+pchG	4.03E+12	0.0	17700.0
5348.	pchqjE+pch=pchqE+pchA	6.05E+12	0.0	20430.0
5349.	pchqjE+pch=pchqE+pchB	4.03E+12	0.0	17700.0
5350.	pchqjE+pch=pchqE+pchC	4.03E+12	0.0	17700.0
5351.	pchqjE+pch=pchqE+pchD	2.02E+12	0.0	16000.0
5352.	pchqjE+pch=pchqE+pchE	8.06E+12	0.0	17700.0
5353.	pchqjE+pch=pchqE+pchF	8.06E+12	0.0	17700.0
5354.	pchqjE+pch=pchqE+pchG	4.03E+12	0.0	17700.0
5355.	pchqjF+pch=pchqF+pchA	6.05E+12	0.0	20430.0
5356.	pchqjF+pch=pchqF+pchB	4.03E+12	0.0	17700.0
5357.	pchqjF+pch=pchqF+pchC	4.03E+12	0.0	17700.0
5358.	pchqjF+pch=pchqF+pchD	2.02E+12	0.0	16000.0
5359.	pchqjF+pch=pchqF+pchE	8.06E+12	0.0	17700.0
5360.	pchqjF+pch=pchqF+pchF	8.06E+12	0.0	17700.0
5361.	pchqjF+pch=pchqF+pchG	4.03E+12	0.0	17700.0
5362.	pchqjG+pch=pchqG+pchA	6.05E+12	0.0	20430.0
5363.	pchqjG+pch=pchqG+pchB	4.03E+12	0.0	17700.0
5364.	pchqjG+pch=pchqG+pchC	4.03E+12	0.0	17700.0
5365.	pchqjG+pch=pchqG+pchD	2.02E+12	0.0	16000.0
5366.	pchqjG+pch=pchqG+pchE	8.06E+12	0.0	17700.0
5367.	pchqjG+pch=pchqG+pchF	8.06E+12	0.0	17700.0
5368.	pchqjG+pch=pchqG+pchG	4.03E+12	0.0	17700.0
5369.	pchqjB+ch3=pchojB+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5370.	pchqjA+ch3=pchojA+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5371.	pchqjC+ch3=pchojC+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5372.	pchqjD+ch3=pchojD+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5373.	pchqjE+ch3=pchojE+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5374.	pchqjF+ch3=pchojF+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5375.	pchqjG+ch3=pchojG+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5376.	pchqjA+c2h5=pchojA+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5377.	pchqjB+c2h5=pchojB+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5378.	pchqjC+c2h5=pchojC+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5379.	pchqjD+c2h5=pchojD+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5380.	pchqjE+c2h5=pchojE+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5381.	pchqjF+c2h5=pchojF+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5382.	pchqjG+c2h5=pchojG+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5383.	pchqjA+nc3h7=pchojA+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5384.	pchqjB+nc3h7=pchojB+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5385.	pchqjC+nc3h7=pchojC+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5386.	pchqjD+nc3h7=pchojD+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5387.	pchqjE+nc3h7=pchojE+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5388.	pchqjF+nc3h7=pchojF+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5389.	pchqjG+nc3h7=pchojG+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5390.	pchqjA+ic3h7=pchojA+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5391.	pchqjB+ic3h7=pchojB+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5392.	pchqjC+ic3h7=pchojC+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5393.	pchqjD+ic3h7=pchojD+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5394.	pchqjE+ic3h7=pchojE+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5395.	pchqjF+ic3h7=pchojF+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5396.	pchqjG+ic3h7=pchojG+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5397.	pchqjA+ac3h5=pchojA+c3h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5398.	pchqjB+ac3h5=pchojB+c3h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5399.	pchqjC+ac3h5=pchojC+c3h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5400.	pchqjD+ac3h5=pchojD+c3h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5401.	pchqjE+ac3h5=pchojE+c3h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5402.	pchqjF+ac3h5=pchojF+c3h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5403.	pchqjG+ac3h5=pchojG+c3h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5404.	pchqjA+ho2=>pchojA+oh+o2	1.40E-14	-1.6	1860.0
5405.	pchqjB+ho2=>pchojB+oh+o2	1.40E-14	-1.6	1860.0
5406.	pchqjC+ho2=>pchojC+oh+o2	1.40E-14	-1.6	1860.0
5407.	pchqjD+ho2=>pchojD+oh+o2	1.40E-14	-1.6	1860.0
5408.	pchqjE+ho2=>pchojE+oh+o2	1.40E-14	-1.6	1860.0
5409.	pchqjF+ho2=>pchojF+oh+o2	1.40E-14	-1.6	1860.0
5410.	pchqjG+ho2=>pchojG+oh+o2	1.40E-14	-1.6	1860.0
5411.	pchqjA+ch3o2=>pchojA+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5412.	pchqjB+ch3o2=>pchojB+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5413.	pchqjC+ch3o2=>pchojC+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5414.	pchqjD+ch3o2=>pchojD+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5415.	pchqjE+ch3o2=>pchojE+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5416.	pchqjF+ch3o2=>pchojF+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5417.	pchqjG+ch3o2=>pchojG+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5418.	pchqjA+c2h5o2=>pchojA+c2h5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5419.	pchqjB+c2h5o2=>pchojB+c2h5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5420.	pchqjC+c2h5o2=>pchojC+c2h5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

5421.	pchqjD+c2h5o2=>pchojD+c2h5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5422.	pchqjE+c2h5o2=>pchojE+c2h5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5423.	pchqjF+c2h5o2=>pchojF+c2h5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5424.	pchqjG+c2h5o2=>pchojG+c2h5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5425.	pchqjA+nc3h7o2=>pchojA+nc3h7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5426.	pchqjB+nc3h7o2=>pchojB+nc3h7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5427.	pchqjC+nc3h7o2=>pchojC+nc3h7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5428.	pchqjD+nc3h7o2=>pchojD+nc3h7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5429.	pchqjE+nc3h7o2=>pchojE+nc3h7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5430.	pchqjF+nc3h7o2=>pchojF+nc3h7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5431.	pchqjG+nc3h7o2=>pchojG+nc3h7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5432.	pchqjA+pchqjA=>pchojA+pchojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5433.	pchqjB+pchqjA=>pchojB+pchojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5434.	pchqjC+pchqjA=>pchojC+pchojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5435.	pchqjD+pchqjA=>pchojD+pchojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5436.	pchqjE+pchqjA=>pchojE+pchojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5437.	pchqjF+pchqjA=>pchojF+pchojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5438.	pchqjG+pchqjA=>pchojG+pchojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5439.	pchqjB+pchqjB=>pchojB+pchojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5440.	pchqjC+pchqjB=>pchojC+pchojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5441.	pchqjD+pchqjB=>pchojD+pchojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5442.	pchqjE+pchqjB=>pchojE+pchojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5443.	pchqjF+pchqjB=>pchojF+pchojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5444.	pchqjG+pchqjB=>pchojG+pchojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5445.	pchqjC+pchqjC=>pchojC+pchojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5446.	pchqjD+pchqjC=>pchojD+pchojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5447.	pchqjE+pchqjC=>pchojE+pchojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5448.	pchqjF+pchqjC=>pchojF+pchojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5449.	pchqjG+pchqjC=>pchojG+pchojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5450.	pchqjD+pchqjD=>pchojD+pchojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5451.	pchqjE+pchqjD=>pchojE+pchojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5452.	pchqjF+pchqjD=>pchojF+pchojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5453.	pchqjG+pchqjD=>pchojG+pchojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5454.	pchqjE+pchqjE=>pchojE+pchojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5455.	pchqjF+pchqjE=>pchojF+pchojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5456.	pchqjG+pchqjE=>pchojG+pchojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5457.	pchqjF+pchqjF=>pchojF+pchojF+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5458.	pchqjG+pchqjF=>pchojG+pchojF+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5459.	pchqjG+pchqjG=>pchojG+pchojG+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5460.	pchojA+oh=pchqA	1.81E+13	0.0	0.0
5461.	pchojB+oh=pchqB	1.81E+13	0.0	0.0
5462.	pchojC+oh=pchqC	1.81E+13	0.0	0.0
5463.	pchojD+oh=pchqD	1.81E+13	0.0	0.0
5464.	pchojE+oh=pchqE	1.81E+13	0.0	0.0
5465.	pchojF+oh=pchqF	1.81E+13	0.0	0.0
5466.	pchojG+oh=pchqG	1.81E+13	0.0	0.0
5467.	pche4=c2h4+P2c4h513	1.00E+15	0.0	66900.0
5468.	pche5=c2h4+c7h12-13	1.00E+15	0.0	66900.0
5469.	pche6=c5h10+c4h6	1.00E+15	0.0	66900.0
5470.	pche1+ho2=ApchqB	1.00E+11	0.0	12500.0
5471.	pche1+ho2=BpchqA	8.00E+10	0.0	6000.0
5472.	pche2+ho2=BpchqC	8.00E+10	0.0	6000.0
5473.	pche2+ho2=CpchqB	8.00E+10	0.0	6000.0
5474.	pche3+ho2=CpchqD	8.00E+10	0.0	6000.0
5475.	pche3+ho2=DpchqC	8.00E+10	0.0	6000.0
5476.	pche4+ho2=DpchqE	8.00E+10	0.0	6000.0
5477.	pche4+ho2=EpchqD	8.00E+10	0.0	6000.0
5478.	pche5+ho2=EpchqF	8.00E+10	0.0	6000.0
5479.	pche5+ho2=FpchqE	8.00E+10	0.0	6000.0
5480.	pche6+ho2=FpchqG	8.00E+10	0.0	6000.0
5481.	pche6+ho2=GpchqF	8.00E+10	0.0	6000.0
5482.	pche1+ho2=pcho-AB+oh	1.00E+12	0.0	14400.0
5483.	pche2+ho2=pcho-BC+oh	1.00E+12	0.0	14400.0
5484.	pche3+ho2=pcho-CD+oh	1.00E+12	0.0	14400.0
5485.	pche4+ho2=pcho-DE+oh	1.00E+12	0.0	14400.0
5486.	pche5+ho2=pcho-EF+oh	1.00E+12	0.0	14400.0
5487.	pche6+ho2=pcho-FG+oh	1.00E+12	0.0	14400.0
5488.	pche1+ch3o2=pcho-AB+ch3o	3.97E+11	0.0	11725.0
5489.	pche2+ch3o2=pcho-BC+ch3o	3.98E+11	0.0	12620.0
5490.	pche3+ch3o2=pcho-CD+ch3o	1.45E+11	0.0	10135.0
5491.	pche4+ch3o2=pcho-DE+ch3o	1.45E+11	0.0	10135.0
5492.	pche5+ch3o2=pcho-EF+ch3o	3.98E+11	0.0	12620.0
5493.	pche6+ch3o2=pcho-FG+ch3o	3.98E+11	0.0	12620.0
5494.	pche1+c2h5o2=pcho-AB+c2h5o	3.97E+11	0.0	11725.0
5495.	pche2+c2h5o2=pcho-BC+c2h5o	3.98E+11	0.0	12620.0
5496.	pche3+c2h5o2=pcho-CD+c2h5o	1.45E+11	0.0	10135.0
5497.	pche4+c2h5o2=pcho-DE+c2h5o	1.45E+11	0.0	10135.0
5498.	pche5+c2h5o2=pcho-EF+c2h5o	3.98E+11	0.0	12620.0
5499.	pche6+c2h5o2=pcho-FG+c2h5o	3.98E+11	0.0	12620.0
5500.	pche1+nc3h7o2=pcho-AB+nc3h7o	3.97E+11	0.0	11725.0
5501.	pche2+nc3h7o2=pcho-BC+nc3h7o	3.98E+11	0.0	12620.0
5502.	pche3+nc3h7o2=pcho-CD+nc3h7o	1.45E+11	0.0	10135.0
5503.	pche4+nc3h7o2=pcho-DE+nc3h7o	1.45E+11	0.0	10135.0
5504.	pche5+nc3h7o2=pcho-EF+nc3h7o	3.98E+11	0.0	12620.0
5505.	pche6+nc3h7o2=pcho-FG+nc3h7o	3.98E+11	0.0	12620.0
5506.	pche1+pchqjA=pcho-AB+pchojA	3.97E+11	0.0	11725.0
5507.	pche2+pchqjA=pcho-BC+pchojA	3.98E+11	0.0	12620.0
5508.	pche3+pchqjA=pcho-CD+pchojA	1.45E+11	0.0	10135.0
5509.	pche4+pchqjA=pcho-DE+pchojA	1.45E+11	0.0	10135.0
5510.	pche5+pchqjA=pcho-EF+pchojA	3.98E+11	0.0	12620.0
5511.	pche6+pchqjA=pcho-FG+pchojA	3.98E+11	0.0	12620.0
5512.	pche1+pchqjB=pcho-AB+pchojB	3.97E+11	0.0	11725.0
5513.	pche2+pchqjB=pcho-BC+pchojB	3.98E+11	0.0	12620.0
5514.	pche3+pchqjB=pcho-CD+pchojB	1.45E+11	0.0	10135.0
5515.	pche4+pchqjB=pcho-DE+pchojB	1.45E+11	0.0	10135.0
5516.	pche5+pchqjB=pcho-EF+pchojB	3.98E+11	0.0	12620.0
5517.	pche6+pchqjB=pcho-FG+pchojB	3.98E+11	0.0	12620.0
5518.	pche1+pchqjC=pcho-AB+pchojC	3.97E+11	0.0	11725.0
5519.	pche2+pchqjC=pcho-BC+pchojC	3.98E+11	0.0	12620.0
5520.	pche3+pchqjC=pcho-CD+pchojC	1.45E+11	0.0	10135.0
5521.	pche4+pchqjC=pcho-DE+pchojC	1.45E+11	0.0	10135.0
5522.	pche5+pchqjC=pcho-EF+pchojC	3.98E+11	0.0	12620.0
5523.	pche6+pchqjC=pcho-FG+pchojC	3.98E+11	0.0	12620.0
5524.	pche1+pchqjD=pcho-AB+pchojD	3.97E+11	0.0	11725.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

5525.	pche2+pchqjD=pcho-BC+pchojD	3.98E+11	0.0	12620.0
5526.	pche3+pchqjD=pcho-CD+pchojD	1.45E+11	0.0	10135.0
5527.	pche4+pchqjD=pcho-DE+pchojD	1.45E+11	0.0	10135.0
5528.	pche5+pchqjD=pcho-EF+pchojD	3.98E+11	0.0	12620.0
5529.	pche6+pchqjD=pcho-FG+pchojD	3.98E+11	0.0	12620.0
5530.	pche1+pchqjE=pcho-AB+pchojE	3.97E+11	0.0	11725.0
5531.	pche2+pchqjE=pcho-BC+pchojE	3.98E+11	0.0	12620.0
5532.	pche3+pchqjE=pcho-CD+pchojE	1.45E+11	0.0	10135.0
5533.	pche4+pchqjE=pcho-DE+pchojE	1.45E+11	0.0	10135.0
5534.	pche5+pchqjE=pcho-EF+pchojE	3.98E+11	0.0	12620.0
5535.	pche6+pchqjE=pcho-FG+pchojE	3.98E+11	0.0	12620.0
5536.	pche1+pchqjF=pcho-AB+pchojF	3.97E+11	0.0	11725.0
5537.	pche2+pchqjF=pcho-BC+pchojF	3.98E+11	0.0	12620.0
5538.	pche3+pchqjF=pcho-CD+pchojF	1.45E+11	0.0	10135.0
5539.	pche4+pchqjF=pcho-DE+pchojF	1.45E+11	0.0	10135.0
5540.	pche5+pchqjF=pcho-EF+pchojF	3.98E+11	0.0	12620.0
5541.	pche6+pchqjF=pcho-FG+pchojF	3.98E+11	0.0	12620.0
5542.	pche1+pchqjG=pcho-AB+pchojG	3.97E+11	0.0	11725.0
5543.	pche2+pchqjG=pcho-BC+pchojG	3.98E+11	0.0	12620.0
5544.	pche3+pchqjG=pcho-CD+pchojG	1.45E+11	0.0	10135.0
5545.	pche4+pchqjG=pcho-DE+pchojG	1.45E+11	0.0	10135.0
5546.	pche5+pchqjG=pcho-EF+pchojG	3.98E+11	0.0	12620.0
5547.	pche6+pchqjG=pcho-FG+pchojG	3.98E+11	0.0	12620.0
5548.	pche1+oh=ApchohB	4.75E+12	0.0	-782.0
5549.	pche1+oh=BpchohA	4.75E+12	0.0	-782.0
5550.	pche2+oh=BpchohC	4.75E+12	0.0	-782.0
5551.	pche2+oh=CpchohB	4.75E+12	0.0	-782.0
5552.	pche3+oh=CpchohD	4.75E+12	0.0	-782.0
5553.	pche3+oh=DpchohC	4.75E+12	0.0	-782.0
5554.	pche4+oh=DpchohE	4.75E+12	0.0	-782.0
5555.	pche4+oh=EpchohD	4.75E+12	0.0	-782.0
5556.	pche5+oh=EpchohF	4.75E+12	0.0	-782.0
5557.	pche5+oh=FpchohE	4.75E+12	0.0	-782.0
5558.	pche6+oh=FpchohG	4.75E+12	0.0	-782.0
5559.	pche6+oh=GpchohF	4.75E+12	0.0	-782.0
5560.	pche1+oh=>ch2o+echA	1.40E+12	0.0	-900.0
5561.	pche1+oh=>ch3+echoA	1.40E+12	0.0	-900.0
5562.	pche2+oh=>ch3hco+mchA	1.40E+12	0.0	-900.0
5563.	pche2+oh=>c2h5+mchoA	1.40E+12	0.0	-900.0
5564.	pche3+oh=>ethco+cyc6h11	1.40E+12	0.0	-900.0
5565.	pche3+oh=>nc3h7+chxone	1.40E+12	0.0	-900.0
5566.	pche4+oh=>Fc9oA	1.40E+12	0.0	-900.0
5567.	pche4+oh=>c2h4+Ac7oD	1.40E+12	0.0	-900.0
5568.	pche5+oh=>MeEc8oIrA	1.40E+12	0.0	-900.0
5569.	pche5+oh=>MeEc8oArI	1.40E+12	0.0	-900.0
5570.	pche6+oh=>EtDc7oIrA	1.40E+12	0.0	-900.0
5571.	pche6+oh=>EtDc7oArI	1.40E+12	0.0	-900.0
5572.	pche1+oh=Apche2+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
5573.	pche2+oh=Apche2+h2o	3.12E+06	2.0	-298.0
5574.	pche2+oh=Dpche2+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
5575.	pche3+oh=Dpche2+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
5576.	pche3+oh=Cpche4+h2o	4.50E+13	0.0	2217.0
5577.	pche4+oh=Cpche4+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
5578.	pche4+oh=Dpche5+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
5579.	pche5+oh=Dpche5+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
5580.	pche5+oh=Epche6+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
5581.	pche6+oh=Epche6+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
5582.	pche6+oh=Fpche7+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
5583.	pche1+ho2=Apche2+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
5584.	pche2+ho2=Apche2+h2o2	9.63E+03	2.6	13910.0
5585.	pche2+ho2=Dpche2+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
5586.	pche3+ho2=Dpche2+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
5587.	pche3+ho2=Cpche4+h2o2	6.40E+12	0.0	14900.0
5588.	pche4+ho2=Cpche4+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
5589.	pche4+ho2=Dpche5+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
5590.	pche5+ho2=Dpche5+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
5591.	pche5+ho2=Epche6+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
5592.	pche6+ho2=Epche6+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
5593.	pche6+ho2=Fpche7+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
5594.	pche1+c2h5=Apche2+c2h6	1.00E+11	0.0	7300.0
5595.	pche2+c2h5=Apche2+c2h6	2.23E+00	3.5	6637.0
5596.	pche2+c2h5=Dpche2+c2h6	6.72E+10	0.0	7214.0
5597.	pche3+c2h5=Dpche2+c2h6	1.00E+11	0.0	7300.0
5598.	pche3+c2h5=Cpche4+c2h6	2.00E+11	0.0	7300.0
5599.	pche4+c2h5=Cpche4+c2h6	1.00E+11	0.0	7300.0
5600.	pche4+c2h5=Dpche5+c2h6	1.00E+11	0.0	7300.0
5601.	pche5+c2h5=Dpche5+c2h6	6.72E+10	0.0	7214.0
5602.	pche5+c2h5=Epche6+c2h6	1.00E+11	0.0	7300.0
5603.	pche6+c2h5=Epche6+c2h6	1.00E+11	0.0	7300.0
5604.	pche6+c2h5=Fpche7+c2h6	1.00E+11	0.0	7300.0
5605.	pche1+nc3h7=Apche2+c3h8	1.00E+11	0.0	7300.0
5606.	pche2+nc3h7=Apche2+c3h8	2.23E+00	3.5	6637.0
5607.	pche2+nc3h7=Dpche2+c3h8	6.72E+10	0.0	7214.0
5608.	pche3+nc3h7=Dpche2+c3h8	1.00E+11	0.0	7300.0
5609.	pche3+nc3h7=Cpche4+c3h8	2.00E+11	0.0	7300.0
5610.	pche4+nc3h7=Cpche4+c3h8	1.00E+11	0.0	7300.0
5611.	pche4+nc3h7=Dpche5+c3h8	1.00E+11	0.0	7300.0
5612.	pche5+nc3h7=Dpche5+c3h8	6.72E+10	0.0	7214.0
5613.	pche5+nc3h7=Epche6+c3h8	1.00E+11	0.0	7300.0
5614.	pche6+nc3h7=Epche6+c3h8	1.00E+11	0.0	7300.0
5615.	pche6+nc3h7=Fpche7+c3h8	1.00E+11	0.0	7300.0
5616.	pche1+ic3h7=Apche2+c3h8	1.00E+11	0.0	8300.0
5617.	pche2+ic3h7=Apche2+c3h8	6.62E-02	4.0	8068.0
5618.	pche2+ic3h7=Dpche2+c3h8	6.72E+10	0.0	8214.0
5619.	pche3+ic3h7=Dpche2+c3h8	1.00E+11	0.0	8300.0
5620.	pche3+ic3h7=Cpche4+c3h8	2.00E+11	0.0	8300.0
5621.	pche4+ic3h7=Cpche4+c3h8	1.00E+11	0.0	8300.0
5622.	pche4+ic3h7=Dpche5+c3h8	1.00E+11	0.0	8300.0
5623.	pche5+ic3h7=Dpche5+c3h8	6.72E+10	0.0	8214.0
5624.	pche5+ic3h7=Epche6+c3h8	1.00E+11	0.0	8300.0
5625.	pche6+ic3h7=Epche6+c3h8	1.00E+11	0.0	8300.0
5626.	pche6+ic3h7=Fpche7+c3h8	1.00E+11	0.0	8300.0
5627.	pche1+c2h3=Apche2+c2h4	1.00E+11	0.0	8300.0
5628.	pche2+c2h3=Apche2+c2h4	6.62E-02	4.0	8068.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

5629.	pche2+c2h3=Dpche2+c2h4	6.72E+10	0.0	8214.0
5630.	pche3+c2h3=Dpche2+c2h4	1.00E+11	0.0	8300.0
5631.	pche3+c2h3=Cpche4+c2h4	2.00E+11	0.0	8300.0
5632.	pche4+c2h3=Cpche4+c2h4	1.00E+11	0.0	8300.0
5633.	pche4+c2h3=Dpche5+c2h4	1.00E+11	0.0	8300.0
5634.	pche5+c2h3=Dpche5+c2h4	6.72E+10	0.0	8214.0
5635.	pche5+c2h3=Epche6+c2h4	1.00E+11	0.0	8300.0
5636.	pche6+c2h3=Fpche7+c2h4	1.00E+11	0.0	8300.0
5637.	pche1+c2h5o2=Apche2+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5638.	pche2+c2h5o2=Apche2+c2h5o2h	9.63E+03	2.6	13910.0
5639.	pche2+c2h5o2=Dpche2+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
5640.	pche3+c2h5o2=Dpche2+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5641.	pche3+c2h5o2=Cpche4+c2h5o2h	2.80E+12	0.0	14900.0
5642.	pche4+c2h5o2=Cpche4+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5643.	pche4+c2h5o2=Dpche5+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5644.	pche5+c2h5o2=Dpche5+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
5645.	pche5+c2h5o2=Epche6+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5646.	pche6+c2h5o2=Epche6+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5647.	pche6+c2h5o2=Fpche7+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5648.	pche1+ac3h5=Apche2+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
5649.	pche2+ac3h5=Apche2+c3h6	1.18E+11	0.0	12400.0
5650.	pche2+ac3h5=Dpche2+c3h6	2.80E+12	0.0	11219.0
5651.	pche3+ac3h5=Dpche2+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
5652.	pche3+ac3h5=Cpche4+c3h6	1.58E+11	0.0	12400.0
5653.	pche4+ac3h5=Cpche4+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
5654.	pche4+ac3h5=Dpche5+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
5655.	pche5+ac3h5=Dpche5+c3h6	2.80E+12	0.0	11219.0
5656.	pche5+ac3h5=Epche6+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
5657.	pche6+ac3h5=Epche6+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
5658.	pche6+ac3h5=Fpche7+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
5659.	pche1+nc3h7o2=Apche2+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5660.	pche2+nc3h7o2=Apche2+nc3h7o2h	9.63E+03	2.6	13910.0
5661.	pche2+nc3h7o2=Dpche2+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
5662.	pche3+nc3h7o2=Dpche2+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5663.	pche3+nc3h7o2=Cpche4+nc3h7o2h	2.80E+12	0.0	14900.0
5664.	pche4+nc3h7o2=Cpche4+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5665.	pche4+nc3h7o2=Dpche5+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5666.	pche5+nc3h7o2=Dpche5+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
5667.	pche5+nc3h7o2=Epche6+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5668.	pche6+nc3h7o2=Epche6+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5669.	pche6+nc3h7o2=Fpche7+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5670.	pche1+ch3=Apche2+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
5671.	pche2+ch3=Apche2+ch4	2.21E+00	3.5	5683.0
5672.	pche2+ch3=Dpche2+ch4	1.90E+12	0.0	9010.0
5673.	pche3+ch3=Dpche2+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
5674.	pche3+ch3=Cpche4+ch4	2.00E+11	0.0	7300.0
5675.	pche4+ch3=Cpche4+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
5676.	pche4+ch3=Dpche5+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
5677.	pche5+ch3=Dpche5+ch4	1.90E+12	0.0	9010.0
5678.	pche5+ch3=Epche6+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
5679.	pche6+ch3=Epche6+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
5680.	pche6+ch3=Fpche7+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
5681.	pche1+ch3o2=Apche2+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5682.	pche2+ch3o2=Apche2+ch3o2h	9.63E+03	2.6	13910.0
5683.	pche2+ch3o2=Dpche2+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
5684.	pche3+ch3o2=Dpche2+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5685.	pche3+ch3o2=Cpche4+ch3o2h	2.80E+12	0.0	14900.0
5686.	pche4+ch3o2=Cpche4+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5687.	pche4+ch3o2=Dpche5+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5688.	pche5+ch3o2=Dpche5+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
5689.	pche5+ch3o2=Epche6+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5690.	pche6+ch3o2=Epche6+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5691.	pche6+ch3o2=Fpche7+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
5692.	pche1+H=Apche2+H2	5.00E+13	0.0	3900.0
5693.	pche2+H=Apche2+H2	1.73E+05	2.5	2484.0
5694.	pche2+H=Dpche2+H2	2.63E+14	0.0	8820.0
5695.	pche3+H=Dpche2+H2	5.00E+13	0.0	3900.0
5696.	pche3+H=Cpche4+H2	1.00E+14	0.0	3900.0
5697.	pche4+H=Cpche4+H2	5.00E+13	0.0	3900.0
5698.	pche4+H=Dpche5+H2	5.00E+13	0.0	3900.0
5699.	pche5+H=Dpche5+H2	2.63E+14	0.0	8820.0
5700.	pche5+H=Epche6+H2	5.00E+13	0.0	3900.0
5701.	pche6+H=Epche6+H2	5.00E+13	0.0	3900.0
5702.	pche6+H=Fpche7+H2	5.00E+13	0.0	3900.0
5703.	pche1+O=Apche2+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
5704.	pche2+O=Apche2+oh	1.75E+11	0.7	5882.0
5705.	pche2+O=Dpche2+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
5706.	pche3+O=Dpche2+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
5707.	pche3+O=Cpche4+oh	8.00E+11	0.0	-2100.0
5708.	pche4+O=Cpche4+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
5709.	pche4+O=Dpche5+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
5710.	pche5+O=Dpche5+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
5711.	pche5+O=Epche6+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
5712.	pche6+O=Epche6+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
5713.	pche6+O=Fpche7+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
5714.	pche1+pchA=Apche2+pch	1.00E+11	0.0	7300.0
5715.	pche2+pchA=Apche2+pch	2.23E+00	3.5	6637.0
5716.	pche2+pchA=Dpche2+pch	6.72E+10	0.0	7214.0
5717.	pche3+pchA=Dpche2+pch	1.00E+11	0.0	7300.0
5718.	pche3+pchA=Cpche4+pch	2.00E+11	0.0	7300.0
5719.	pche4+pchA=Cpche4+pch	1.00E+11	0.0	7300.0
5720.	pche4+pchA=Dpche5+pch	1.00E+11	0.0	7300.0
5721.	pche5+pchA=Dpche5+pch	6.72E+10	0.0	7214.0
5722.	pche5+pchA=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	7300.0
5723.	pche6+pchA=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	7300.0
5724.	pche6+pchA=Fpche7+pch	1.00E+11	0.0	7300.0
5725.	pche1+pchB=Apche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5726.	pche2+pchB=Apche2+pch	6.62E-02	4.0	8068.0
5727.	pche2+pchB=Dpche2+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
5728.	pche3+pchB=Dpche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5729.	pche3+pchB=Cpche4+pch	2.00E+11	0.0	8300.0
5730.	pche4+pchB=Cpche4+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5731.	pche4+pchB=Dpche5+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5732.	pche5+pchB=Dpche5+pch	6.72E+10	0.0	7214.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

5733.	pche5+pchB=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5734.	pche6+pchB=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5735.	pche6+pchB=Fpche7+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5736.	pche1+pchC=Apche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5737.	pche2+pchC=Apche2+pch	6.62E-02	4.0	8068.0
5738.	pche2+pchC=Dpche2+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
5739.	pche3+pchC=Dpche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5740.	pche3+pchC=Cpche4+pch	2.00E+11	0.0	8300.0
5741.	pche4+pchC=Cpche4+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5742.	pche4+pchC=Dpche5+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5743.	pche5+pchC=Dpche5+pch	6.72E+10	0.0	7214.0
5744.	pche5+pchC=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5745.	pche6+pchC=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5746.	pche6+pchC=Fpche7+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5747.	pche1+pchD=Apche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5748.	pche2+pchD=Apche2+pch	6.62E-02	4.0	8068.0
5749.	pche2+pchD=Dpche2+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
5750.	pche3+pchD=Dpche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5751.	pche3+pchD=Cpche4+pch	2.00E+11	0.0	8300.0
5752.	pche4+pchD=Cpche4+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5753.	pche4+pchD=Dpche5+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5754.	pche5+pchD=Dpche5+pch	6.72E+10	0.0	7214.0
5755.	pche5+pchD=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5756.	pche6+pchD=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5757.	pche6+pchD=Fpche7+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5758.	pche1+pchE=Apche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5759.	pche2+pchE=Apche2+pch	6.62E-02	4.0	8068.0
5760.	pche2+pchE=Dpche2+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
5761.	pche3+pchE=Dpche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5762.	pche3+pchE=Cpche4+pch	2.00E+11	0.0	8300.0
5763.	pche4+pchE=Cpche4+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5764.	pche4+pchE=Dpche5+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5765.	pche5+pchE=Dpche5+pch	6.72E+10	0.0	7214.0
5766.	pche5+pchE=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5767.	pche6+pchE=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5768.	pche6+pchE=Fpche7+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5769.	pche1+pchF=Apche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5770.	pche2+pchF=Apche2+pch	6.62E-02	4.0	8068.0
5771.	pche2+pchF=Dpche2+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
5772.	pche3+pchF=Dpche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5773.	pche3+pchF=Cpche4+pch	2.00E+11	0.0	8300.0
5774.	pche4+pchF=Cpche4+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5775.	pche4+pchF=Dpche5+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5776.	pche5+pchF=Dpche5+pch	6.72E+10	0.0	7214.0
5777.	pche5+pchF=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5778.	pche6+pchF=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5779.	pche6+pchF=Fpche7+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5780.	pche1+pchG=Apche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5781.	pche2+pchG=Apche2+pch	6.62E-02	4.0	8068.0
5782.	pche2+pchG=Dpche2+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
5783.	pche3+pchG=Dpche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5784.	pche3+pchG=Cpche4+pch	2.00E+11	0.0	8300.0
5785.	pche4+pchG=Cpche4+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5786.	pche4+pchG=Dpche5+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5787.	pche5+pchG=Dpche5+pch	6.72E+10	0.0	7214.0
5788.	pche5+pchG=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5789.	pche6+pchG=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5790.	pche6+pchG=Fpche7+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
5791.	pche1+pchqjA=Apche2+pchqA	1.40E+12	0.0	14900.0
5792.	pche2+pchqjA=Apche2+pchqA	9.63E+03	2.6	13910.0
5793.	pche2+pchqjA=Dpche2+pchqA	2.66E+11	0.0	11269.0
5794.	pche3+pchqjA=Dpche2+pchqA	1.40E+12	0.0	14900.0
5795.	pche3+pchqjA=Cpche4+pchqA	2.80E+12	0.0	14900.0
5796.	pche4+pchqjA=Cpche4+pchqA	1.40E+12	0.0	14900.0
5797.	pche4+pchqjA=Dpche5+pchqA	1.40E+12	0.0	14900.0
5798.	pche5+pchqjA=Dpche5+pchqA	2.66E+11	0.0	11269.0
5799.	pche5+pchqjA=Epche6+pchqA	1.40E+12	0.0	14900.0
5800.	pche6+pchqjA=Epche6+pchqA	1.40E+12	0.0	14900.0
5801.	pche6+pchqjA=Fpche7+pchqA	1.40E+12	0.0	14900.0
5802.	pche1+pchqjB=Apche2+pchqB	1.40E+12	0.0	14900.0
5803.	pche2+pchqjB=Apche2+pchqB	9.63E+03	2.6	13910.0
5804.	pche2+pchqjB=Dpche2+pchqB	2.66E+11	0.0	11269.0
5805.	pche3+pchqjB=Dpche2+pchqB	1.40E+12	0.0	14900.0
5806.	pche3+pchqjB=Cpche4+pchqB	2.80E+12	0.0	14900.0
5807.	pche4+pchqjB=Cpche4+pchqB	1.40E+12	0.0	14900.0
5808.	pche4+pchqjB=Dpche5+pchqB	1.40E+12	0.0	14900.0
5809.	pche5+pchqjB=Dpche5+pchqB	2.66E+11	0.0	11269.0
5810.	pche5+pchqjB=Epche6+pchqB	1.40E+12	0.0	14900.0
5811.	pche6+pchqjB=Epche6+pchqB	1.40E+12	0.0	14900.0
5812.	pche6+pchqjB=Fpche7+pchqB	1.40E+12	0.0	14900.0
5813.	pche1+pchqjC=Apche2+pchqC	1.40E+12	0.0	14900.0
5814.	pche2+pchqjC=Apche2+pchqC	9.63E+03	2.6	13910.0
5815.	pche2+pchqjC=Dpche2+pchqC	2.66E+11	0.0	11269.0
5816.	pche3+pchqjC=Dpche2+pchqC	1.40E+12	0.0	14900.0
5817.	pche3+pchqjC=Cpche4+pchqC	2.80E+12	0.0	14900.0
5818.	pche4+pchqjC=Cpche4+pchqC	1.40E+12	0.0	14900.0
5819.	pche4+pchqjC=Dpche5+pchqC	1.40E+12	0.0	14900.0
5820.	pche5+pchqjC=Dpche5+pchqC	2.66E+11	0.0	11269.0
5821.	pche5+pchqjC=Epche6+pchqC	1.40E+12	0.0	14900.0
5822.	pche6+pchqjC=Epche6+pchqC	1.40E+12	0.0	14900.0
5823.	pche6+pchqjC=Fpche7+pchqC	1.40E+12	0.0	14900.0
5824.	pche1+pchqjD=Apche2+pchqD	1.40E+12	0.0	14900.0
5825.	pche2+pchqjD=Apche2+pchqD	9.63E+03	2.6	13910.0
5826.	pche2+pchqjD=Dpche2+pchqD	2.66E+11	0.0	11269.0
5827.	pche3+pchqjD=Dpche2+pchqD	1.40E+12	0.0	14900.0
5828.	pche3+pchqjD=Cpche4+pchqD	2.80E+12	0.0	14900.0
5829.	pche4+pchqjD=Cpche4+pchqD	1.40E+12	0.0	14900.0
5830.	pche4+pchqjD=Dpche5+pchqD	1.40E+12	0.0	14900.0
5831.	pche5+pchqjD=Dpche5+pchqD	2.66E+11	0.0	11269.0
5832.	pche5+pchqjD=Epche6+pchqD	1.40E+12	0.0	14900.0
5833.	pche6+pchqjD=Epche6+pchqD	1.40E+12	0.0	14900.0
5834.	pche6+pchqjD=Fpche7+pchqD	1.40E+12	0.0	14900.0
5835.	pche1+pchqjE=Apche2+pchqE	1.40E+12	0.0	14900.0
5836.	pche2+pchqjE=Apche2+pchqE	9.63E+03	2.6	13910.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

5837.	pche2+pchqjE=Dpche2+pchqE	2.66E+11	0.0	11269.0
5838.	pche3+pchqjE=Dpche2+pchqE	1.40E+12	0.0	14900.0
5839.	pche3+pchqjE=Cpche4+pchqE	2.80E+12	0.0	14900.0
5840.	pche4+pchqjE=Cpche4+pchqE	1.40E+12	0.0	14900.0
5841.	pche4+pchqjE=Dpche5+pchqE	1.40E+12	0.0	14900.0
5842.	pche5+pchqjE=Dpche5+pchqE	2.66E+11	0.0	11269.0
5843.	pche5+pchqjE=Epche6+pchqE	1.40E+12	0.0	14900.0
5844.	pche6+pchqjE=Epche6+pchqE	1.40E+12	0.0	14900.0
5845.	pche6+pchqjE=Fpche7+pchqE	1.40E+12	0.0	14900.0
5846.	pche1+pchqjF=Apche2+pchqF	1.40E+12	0.0	14900.0
5847.	pche2+pchqjF=Apche2+pchqF	9.63E+03	2.6	13910.0
5848.	pche2+pchqjF=Dpche2+pchqF	2.66E+11	0.0	11269.0
5849.	pche3+pchqjF=Dpche2+pchqF	1.40E+12	0.0	14900.0
5850.	pche3+pchqjF=Cpche4+pchqF	2.80E+12	0.0	14900.0
5851.	pche4+pchqjF=Cpche4+pchqF	1.40E+12	0.0	14900.0
5852.	pche4+pchqjF=Dpche5+pchqF	1.40E+12	0.0	14900.0
5853.	pche5+pchqjF=Dpche5+pchqF	2.66E+11	0.0	11269.0
5854.	pche5+pchqjF=Epche6+pchqF	1.40E+12	0.0	14900.0
5855.	pche6+pchqjF=Epche6+pchqF	1.40E+12	0.0	14900.0
5856.	pche6+pchqjF=Fpche7+pchqF	1.40E+12	0.0	14900.0
5857.	pche1+pchqjG=Apche2+pchqG	1.40E+12	0.0	14900.0
5858.	pche2+pchqjG=Apche2+pchqG	9.63E+03	2.6	13910.0
5859.	pche2+pchqjG=Dpche2+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5860.	pche3+pchqjG=Dpche2+pchqG	1.40E+12	0.0	14900.0
5861.	pche3+pchqjG=Cpche4+pchqG	2.80E+12	0.0	14900.0
5862.	pche4+pchqjG=Cpche4+pchqG	1.40E+12	0.0	14900.0
5863.	pche4+pchqjG=Dpche5+pchqG	1.40E+12	0.0	14900.0
5864.	pche5+pchqjG=Dpche5+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5865.	pche5+pchqjG=Epche6+pchqG	1.40E+12	0.0	14900.0
5866.	pche6+pchqjG=Epche6+pchqG	1.40E+12	0.0	14900.0
5867.	pche6+pchqjG=Fpche7+pchqG	1.40E+12	0.0	14900.0
5868.	pcho-AB+ch3=ApchoB+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5869.	pcho-AB+ch3=BpchoA+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5870.	pcho-AB+ch3o2=ApchoB+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5871.	pcho-AB+ch3o2=BpchoA+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5872.	pcho-AB+H=ApchoB+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5873.	pcho-AB+H=BpchoA+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5874.	pcho-AB+ho2=ApchoB+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5875.	pcho-AB+ho2=BpchoA+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5876.	pcho-AB+O=ApchoB+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5877.	pcho-AB+O=BpchoA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5878.	pcho-AB+oh=ApchoB+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5879.	pcho-AB+oh=BpchoA+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5880.	pcho-AC+ch3=ApchoC+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5881.	pcho-AC+ch3=CpchoA+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5882.	pcho-AC+ch3o2=ApchoC+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5883.	pcho-AC+ch3o2=CpchoA+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5884.	pcho-AC+H=ApchoC+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5885.	pcho-AC+H=CpchoA+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5886.	pcho-AC+ho2=ApchoC+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5887.	pcho-AC+ho2=CpchoA+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5888.	pcho-AC+O=ApchoC+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5889.	pcho-AC+O=CpchoA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5890.	pcho-AC+oh=ApchoC+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5891.	pcho-AC+oh=CpchoA+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5892.	pcho-AD+ch3=DpchoA+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5893.	pcho-AD+ch3o2=DpchoA+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5894.	pcho-AD+H=DpchoA+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5895.	pcho-AD+ho2=DpchoA+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5896.	pcho-AD+O=DpchoA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5897.	pcho-AD+oh=DpchoA+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5898.	pcho-AE+ch3=ApchoE+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5899.	pcho-AE+ch3=EpchoA+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5900.	pcho-AE+ch3o2=ApchoE+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5901.	pcho-AE+ch3o2=EpchoA+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5902.	pcho-AE+H=ApchoE+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5903.	pcho-AE+H=EpchoA+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5904.	pcho-AE+ho2=ApchoE+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5905.	pcho-AE+ho2=EpchoA+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5906.	pcho-AE+O=ApchoE+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5907.	pcho-AE+O=EpchoA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5908.	pcho-AE+oh=ApchoE+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5909.	pcho-AE+oh=EpchoA+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5910.	pcho-AF+ch3=ApchoF+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5911.	pcho-AF+ch3=FpchoA+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5912.	pcho-AF+ch3o2=ApchoF+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5913.	pcho-AF+ch3o2=FpchoA+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5914.	pcho-AF+H=ApchoF+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5915.	pcho-AF+H=FpchoA+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5916.	pcho-AF+ho2=ApchoF+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5917.	pcho-AF+ho2=FpchoA+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5918.	pcho-AF+O=ApchoF+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5919.	pcho-AF+O=FpchoA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5920.	pcho-AF+oh=ApchoF+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5921.	pcho-AF+oh=FpchoA+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5922.	pcho-BC+ch3=BpchoC+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5923.	pcho-BC+ch3=CpchoB+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5924.	pcho-BC+ch3o2=BpchoC+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5925.	pcho-BC+ch3o2=CpchoB+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5926.	pcho-BC+H=BpchoC+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5927.	pcho-BC+H=CpchoB+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5928.	pcho-BC+ho2=BpchoC+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5929.	pcho-BC+ho2=CpchoB+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5930.	pcho-BC+O=BpchoC+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5931.	pcho-BC+O=CpchoB+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5932.	pcho-BC+oh=BpchoC+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5933.	pcho-BC+oh=CpchoB+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5934.	pcho-BD+ch3=DpchoB+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5935.	pcho-BD+ch3o2=DpchoB+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5936.	pcho-BD+H=DpchoB+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5937.	pcho-BD+ho2=DpchoB+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5938.	pcho-BD+O=DpchoB+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5939.	pcho-BD+oh=DpchoB+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5940.	pcho-BE+ch3=BpchoE+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

5941.	pcho-BE+ch3=EpchoB+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5942.	pcho-BE+ch3o2=BpchoE+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5943.	pcho-BE+ch3o2=EpchoB+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5944.	pcho-BE+H=BpchoE+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5945.	pcho-BE+H=EpchoB+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5946.	pcho-BE+ho2=BpchoE+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5947.	pcho-BE+ho2=EpchoB+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5948.	pcho-BE+O=BpchoE+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5949.	pcho-BE+O=EpchoB+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5950.	pcho-BE+oh=BpchoE+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5951.	pcho-BE+oh=EpchoB+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5952.	pcho-BF+ch3=BpchoF+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5953.	pcho-BF+ch3=FpchoB+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5954.	pcho-BF+ch3o2=BpchoF+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5955.	pcho-BF+ch3o2=FpchoB+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5956.	pcho-BF+H=BpchoF+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5957.	pcho-BF+H=FpchoB+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5958.	pcho-BF+ho2=BpchoF+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5959.	pcho-BF+ho2=FpchoB+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5960.	pcho-BF+O=BpchoF+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5961.	pcho-BF+O=FpchoB+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5962.	pcho-BF+oh=BpchoF+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5963.	pcho-BF+oh=FpchoB+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5964.	pcho-BG+ch3=BpchoG+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5965.	pcho-BG+ch3=GpchoB+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5966.	pcho-BG+ch3o2=BpchoG+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5967.	pcho-BG+ch3o2=GpchoB+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5968.	pcho-BG+H=BpchoG+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5969.	pcho-BG+H=GpchoB+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5970.	pcho-BG+ho2=BpchoG+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5971.	pcho-BG+ho2=GpchoB+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5972.	pcho-BG+O=BpchoG+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5973.	pcho-BG+O=GpchoB+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5974.	pcho-BG+oh=BpchoG+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5975.	pcho-BG+oh=GpchoB+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5976.	pcho-CD+ch3=DpchoC+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5977.	pcho-CD+ch3o2=DpchoC+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5978.	pcho-CD+H=DpchoC+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5979.	pcho-CD+ho2=DpchoC+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5980.	pcho-CD+O=DpchoC+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5981.	pcho-CD+oh=DpchoC+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5982.	pcho-CE+ch3=CpchoE+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5983.	pcho-CE+ch3=EpchoC+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5984.	pcho-CE+ch3o2=CpchoE+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5985.	pcho-CE+ch3o2=EpchoC+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5986.	pcho-CE+H=CpchoE+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5987.	pcho-CE+H=EpchoC+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5988.	pcho-CE+ho2=CpchoE+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5989.	pcho-CE+ho2=EpchoC+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
5990.	pcho-CE+O=CpchoE+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5991.	pcho-CE+O=EpchoC+oh	5.00E+12	0.0	0.0
5992.	pcho-CE+oh=CpchoE+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5993.	pcho-CE+oh=EpchoC+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5994.	pcho-CF+ch3=CpchoF+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5995.	pcho-CF+ch3=FpchoC+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
5996.	pcho-CF+ch3o2=CpchoF+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5997.	pcho-CF+ch3o2=FpchoC+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
5998.	pcho-CF+H=CpchoF+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
5999.	pcho-CF+H=FpchoC+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
6000.	pcho-CF+ho2=CpchoF+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
6001.	pcho-CF+ho2=FpchoC+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
6002.	pcho-CF+O=CpchoF+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6003.	pcho-CF+O=FpchoC+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6004.	pcho-CF+oh=CpchoF+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
6005.	pcho-CF+oh=FpchoC+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
6006.	pcho-CG+ch3=CpchoG+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
6007.	pcho-CG+ch3=GpchoC+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
6008.	pcho-CG+ch3o2=CpchoG+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
6009.	pcho-CG+ch3o2=GpchoC+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
6010.	pcho-CG+H=CpchoG+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
6011.	pcho-CG+H=GpchoC+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
6012.	pcho-CG+ho2=CpchoG+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
6013.	pcho-CG+ho2=GpchoC+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
6014.	pcho-CG+O=CpchoG+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6015.	pcho-CG+O=GpchoC+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6016.	pcho-CG+oh=CpchoG+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
6017.	pcho-CG+oh=GpchoC+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
6018.	pcho-DE+ch3=DpchoE+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
6019.	pcho-DE+ch3o2=DpchoE+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
6020.	pcho-DE+H=DpchoE+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
6021.	pcho-DE+ho2=DpchoE+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
6022.	pcho-DE+O=DpchoE+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6023.	pcho-DE+oh=DpchoE+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
6024.	pcho-DF+ch3=DpchoF+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
6025.	pcho-DF+ch3o2=DpchoF+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
6026.	pcho-DF+H=DpchoF+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
6027.	pcho-DF+ho2=DpchoF+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
6028.	pcho-DF+O=DpchoF+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6029.	pcho-DF+oh=DpchoF+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
6030.	pcho-DG+ch3=DpchoG+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
6031.	pcho-DG+ch3o2=DpchoG+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
6032.	pcho-DG+H=DpchoG+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
6033.	pcho-DG+ho2=DpchoG+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
6034.	pcho-DG+O=DpchoG+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6035.	pcho-DG+oh=DpchoG+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
6036.	pcho-EF+ch3=EpchoF+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
6037.	pcho-EF+ch3=FpchoE+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
6038.	pcho-EF+ch3o2=EpchoF+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
6039.	pcho-EF+ch3o2=FpchoE+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
6040.	pcho-EF+H=EpchoF+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
6041.	pcho-EF+H=FpchoE+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
6042.	pcho-EF+ho2=EpchoF+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
6043.	pcho-EF+ho2=FpchoE+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
6044.	pcho-EF+O=EpchoF+oh	5.00E+12	0.0	0.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

6045.	pcho-EF+O=FpchoE+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6046.	pcho-EF+oh=EpchoF+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
6047.	pcho-EF+oh=FpchoE+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
6048.	pcho-EG+ch3=EpchoG+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
6049.	pcho-EG+ch3=GpchoE+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
6050.	pcho-EG+ch3o2=EpchoG+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
6051.	pcho-EG+ch3o2=GpchoE+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
6052.	pcho-EG+H=EpchoG+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
6053.	pcho-EG+H=GpchoE+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
6054.	pcho-EG+ho2=EpchoG+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
6055.	pcho-EG+ho2=GpchoE+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
6056.	pcho-EG+O=EpchoG+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6057.	pcho-EG+O=GpchoE+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6058.	pcho-EG+oh=EpchoG+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
6059.	pcho-EG+oh=GpchoE+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
6060.	pcho-EH+ch3=EpchoH+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
6061.	pcho-EH+ch3=HpchoE+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
6062.	pcho-EH+ch3o2=EpchoH+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
6063.	pcho-EH+ch3o2=HpchoE+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
6064.	pcho-EH+H=EpchoH+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
6065.	pcho-EH+H=HpchoE+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
6066.	pcho-EH+ho2=EpchoH+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
6067.	pcho-EH+ho2=HpchoE+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
6068.	pcho-EH+O=EpchoH+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6069.	pcho-EH+O=HpchoE+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6070.	pcho-EH+oh=EpchoH+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
6071.	pcho-EH+oh=HpchoE+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
6072.	pcho-EI+ch3=IpchoE+ch4	4.00E+11	0.0	10000.0
6073.	pcho-EI+ch3o2=IpchoE+ch3o2h	2.00E+13	0.0	19000.0
6074.	pcho-EI+H=IpchoE+H2	5.40E+07	2.0	5000.0
6075.	pcho-EI+ho2=IpchoE+h2o2	8.00E+12	0.0	17000.0
6076.	pcho-EI+O=IpchoE+oh	1.00E+13	0.0	0.0
6077.	pcho-EI+oh=IpchoE+h2o	1.56E+07	2.0	-765.0
6078.	pcho-FG+ch3=FpchoG+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
6079.	pcho-FG+ch3=GpchoF+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
6080.	pcho-FG+ch3o2=FpchoG+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
6081.	pcho-FG+ch3o2=GpchoF+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
6082.	pcho-FG+H=FpchoG+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
6083.	pcho-FG+H=GpchoF+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
6084.	pcho-FG+ho2=FpchoG+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
6085.	pcho-FG+ho2=GpchoF+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
6086.	pcho-FG+O=FpchoG+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6087.	pcho-FG+O=GpchoF+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6088.	pcho-FG+oh=FpchoG+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
6089.	pcho-FG+oh=GpchoF+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
6090.	pcho-FH+ch3=HpchoF+ch4	4.00E+11	0.0	10000.0
6091.	pcho-FH+ch3o2=HpchoF+ch3o2h	2.00E+13	0.0	19000.0
6092.	pcho-FH+H=HpchoF+H2	5.40E+07	2.0	5000.0
6093.	pcho-FH+ho2=HpchoF+h2o2	8.00E+12	0.0	17000.0
6094.	pcho-FH+O=HpchoF+oh	1.00E+13	0.0	0.0
6095.	pcho-FH+oh=HpchoF+h2o	1.56E+07	2.0	-765.0
6096.	ApchohB+o2=Ao2pchohB	2.00E+12	0.0	0.0
6097.	BpchohA+o2=Bo2pchohA	2.00E+12	0.0	0.0
6098.	BpchohC+o2=Bo2pchohC	2.00E+12	0.0	0.0
6099.	CpchohB+o2=Co2pchohB	2.00E+12	0.0	0.0
6100.	CpchohD+o2=Co2pchohD	2.00E+12	0.0	0.0
6101.	DpchohC+o2=Do2pchohC	2.00E+12	0.0	0.0
6102.	DpchohE+o2=Do2pchohE	2.00E+12	0.0	0.0
6103.	EpchohD+o2=Eo2pchohD	2.00E+12	0.0	0.0
6104.	EpchohF+o2=Eo2pchohF	2.00E+12	0.0	0.0
6105.	FpchohE+o2=Fo2pchohE	2.00E+12	0.0	0.0
6106.	FpchohG+o2=Fo2pchohG	2.00E+12	0.0	0.0
6107.	GpchohF+o2=Go2pchohF	2.00E+12	0.0	0.0
6108.	Ao2pchohB=>oh+echoA+ch2o	1.00E+16	0.0	25000.0
6109.	Bo2pchohA=>oh+echoA+ch2o	1.00E+16	0.0	25000.0
6110.	Bo2pchohC=>oh+mchoA+ch3hco	1.00E+16	0.0	25000.0
6111.	Co2pchohB=>oh+mchoA+ch3hco	1.00E+16	0.0	25000.0
6112.	Co2pchohD=>oh+chxone+ethco	1.00E+16	0.0	25000.0
6113.	Do2pchohC=>oh+chxone+ethco	1.00E+16	0.0	25000.0
6114.	Do2pchohE=>oh+c9oAoF	1.00E+16	0.0	25000.0
6115.	Eo2pchohD=>oh+c9oAoF	1.00E+16	0.0	25000.0
6116.	Eo2pchohF=>oh+MeEc8oAoI	1.00E+16	0.0	25000.0
6117.	Fo2pchohE=>oh+MeEc8oAoI	1.00E+16	0.0	25000.0
6118.	Fo2pchohG=>oh+EtDc7oAoI	1.00E+16	0.0	25000.0
6119.	Go2pchohF=>oh+EtDc7oAoI	1.00E+16	0.0	25000.0
6120.	c9oAoF+oh=c9oyAoF+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
6121.	c9oAoF+H=c9oyAoF+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
6122.	c9oAoF+ho2=c9oyAoF+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
6123.	c9oyAoF=Hc8oD+co	2.00E+13	0.0	28700.0
6124.	c9oyAoF+ho2=Hc8oD+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
6125.	c2h4+Ac6oC=Hc8oD	1.76E+04	2.5	6130.0
6126.	c2h4+c3h7co=Ac6oC	1.00E+11	0.0	7800.0
6127.	MeEc8oAoI+oh=MeEc8oAoyI+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
6128.	MeEc8oAoI+H=MeEc8oAoyI+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
6129.	MeEc8oAoI+ho2=MeEc8oAoyI+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
6130.	MeEc8oAoI+oh=MeEc8oyAoI+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
6131.	MeEc8oAoI+H=MeEc8oyAoI+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
6132.	MeEc8oAoI+ho2=MeEc8oyAoI+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
6133.	MeEc8oAoyI=Ec8oA+co	2.00E+13	0.0	28700.0
6134.	MeEc8oAoyI+ho2=Ec8oA+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
6135.	MeEc8oyAoI=MeDc7oHrA+co	2.00E+13	0.0	28700.0
6136.	MeEc8oyAoI+ho2=MeDc7oHrA+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
6137.	c2h4+MeBc5oArF=MeDc7oHrA	1.76E+04	2.5	6130.0
6138.	c5h10+hco=MeBc5oArF	1.76E+04	2.5	6130.0
6139.	nc3h7+acrol=MeBc5oArF	1.76E+04	2.5	6130.0
6140.	ch2ch2hco+c5h10=Ec8oA	1.76E+04	2.5	6130.0
6141.	c6e5oA+c2h5=Ec8oA	1.76E+04	2.5	6130.0
6142.	EtDc7oAoI+oh=EtDc7oAoyI+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
6143.	EtDc7oAoI+H=EtDc7oAoyI+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
6144.	EtDc7oAoI+ho2=EtDc7oAoyI+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
6145.	EtDc7oAoI+oh=EtDc7oyAoI+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
6146.	EtDc7oAoI+H=EtDc7oyAoI+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
6147.	EtDc7oAoI+ho2=EtDc7oyAoI+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
6148.	EtDc7oAoyI=MeDc7oArH+co	2.00E+13	0.0	28700.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

6149.	EtDc7oAoyI+ho2=MeDc7oArH+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
6150.	EtDc7oyAoI=EtCc6oArH+co	2.00E+13	0.0	28700.0
6151.	EtDc7oyAoI+ho2=EtCc6oArH+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
6152.	c5h10+ch2ch2hco=MeDc7oArH	1.76E+04	2.5	6130.0
6153.	nc3h7+c4h7hco-1=MeDc7oArH	1.76E+04	2.5	6130.0
6154.	c2h4+Cc6oA=EtCc6oArH	1.76E+04	2.5	6130.0
6155.	c5h10+hco=Cc6oA	1.76E+04	2.5	6130.0
6156.	c2h5+ac3h5hco=Cc6oA	1.76E+04	2.5	6130.0
6157.	BpchqA=oh+pcho-AB	7.50E+10	0.0	22000.0
6158.	CpchqA=oh+pcho-AC	6.25E+09	0.0	15250.0
6159.	DpchqA=oh+pcho-AD	5.20E+08	0.0	6500.0
6160.	EpchqA=oh+pcho-AE	4.33E+07	0.0	1800.0
6161.	ApchqB=oh+pcho-AB	2.95E+11	0.0	22000.0
6162.	CpchqB=oh+pcho-BC	2.95E+11	0.0	22000.0
6163.	DpchqB=oh+pcho-BD	2.50E+10	0.0	15250.0
6164.	EpchqB=oh+pcho-BE	2.10E+08	0.0	6500.0
6165.	FpchqB=oh+pcho-BF	1.50E+08	0.0	1800.0
6166.	ApchqC=oh+pcho-AC	2.50E+10	0.0	15250.0
6167.	BpchqC=oh+pcho-BC	2.95E+11	0.0	22000.0
6168.	DpchqC=oh+pcho-CD	2.95E+11	0.0	22000.0
6169.	EpchqC=oh+pcho-CE	2.50E+10	0.0	15250.0
6170.	FpchqC=oh+pcho-CF	2.10E+08	0.0	6500.0
6171.	GpchqC=oh+pcho-CG	1.50E+08	0.0	1800.0
6172.	ApchqD=oh+pcho-AD	2.10E+08	0.0	6500.0
6173.	BpchqD=oh+pcho-BD	2.50E+10	0.0	15250.0
6174.	CpchqD=oh+pcho-CD	2.95E+11	0.0	22000.0
6175.	EpchqD=oh+pcho-DE	5.80E+12	0.0	13400.0
6176.	FpchqD=oh+pcho-DF	1.40E+12	0.0	20000.0
6177.	GpchqD=oh+pcho-DG	8.60E+12	0.0	18500.0
6178.	ApchqE=oh+pcho-AE	1.50E+08	0.0	1800.0
6179.	BpchqE=oh+pcho-BE	2.10E+08	0.0	6500.0
6180.	CpchqE=oh+pcho-CE	2.50E+10	0.0	15250.0
6181.	DpchqE=oh+pcho-DE	5.80E+12	0.0	13400.0
6182.	FpchqE=oh+pcho-EF	5.80E+12	0.0	13400.0
6183.	GpchqE=oh+pcho-EG	1.40E+12	0.0	20000.0
6184.	HpchqE=oh+pcho-EH	8.60E+12	0.0	18500.0
6185.	IpchqE=oh+pcho-EI	1.40E+12	0.0	20000.0
6186.	BpchqF=oh+pcho-BF	1.50E+08	0.0	1800.0
6187.	CpchqF=oh+pcho-CF	2.10E+08	0.0	6500.0
6188.	DpchqF=oh+pcho-DF	1.40E+12	0.0	20000.0
6189.	EpchqF=oh+pcho-EF	5.80E+12	0.0	13400.0
6190.	GpchqF=oh+pcho-FG	5.80E+12	0.0	13400.0
6191.	HpchqF=oh+pcho-FH	1.40E+12	0.0	20000.0
6192.	IpchqF=oh+pcho-EH	8.60E+12	0.0	18500.0
6193.	CpchqG=oh+pcho-CG	1.50E+08	0.0	1800.0
6194.	DpchqG=oh+pcho-DG	8.60E+12	0.0	18500.0
6195.	EpchqG=oh+pcho-EG	1.40E+12	0.0	20000.0
6196.	FpchqG=oh+pcho-FG	5.80E+12	0.0	13400.0
6197.	ApchqA=oh+pchoA	4.80E+12	0.0	28725.0
6198.	BpchqB=oh+pchoB	4.80E+12	0.0	28725.0
6199.	CpchqC=oh+pchoC	4.80E+12	0.0	28725.0
6200.	EpchqE=oh+pchoE	4.80E+12	0.0	28725.0
6201.	FpchqF=oh+pchoF	4.80E+12	0.0	28725.0
6202.	GpchqG=oh+pchoG	4.80E+12	0.0	28725.0
6203.	ApchqC=oh+c2h4+mchoA	5.00E+13	0.0	25500.0
6204.	CpchqA=oh+ch2o+eche1	5.00E+13	0.0	25500.0
6205.	BpchqD=oh+c3h6+chxone	5.00E+13	0.0	25500.0
6206.	DpchqB=oh+ch3hco+mche1	4.00E+12	0.0	19500.0
6207.	CpchqE=oh+c8h15hco	5.00E+13	0.0	25500.0
6208.	EpchqC=oh+ethco+cyc6h10	5.00E+13	0.0	25500.0
6209.	DpchqF=oh+c8h15hco	5.00E+13	0.0	25500.0
6210.	FpchqD=oh+c9e8oD	5.00E+13	0.0	25500.0
6211.	EpchqG=oh+c8h15hco	5.00E+13	0.0	25500.0
6212.	GpchqE=oh+c8h15hco	5.00E+13	0.0	25500.0
6213.	IpchqE=oh+c8h15hco	5.00E+13	0.0	25500.0
6214.	HpchqF=oh+c8h15hco	5.00E+13	0.0	25500.0
6215.	BpchqA+o2=pchqAqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
6216.	CpchqA+o2=pchqAqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
6217.	DpchqA+o2=pchqAqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
6218.	EpchqA+o2=pchqAqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
6219.	FpchqA+o2=pchqAqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
6220.	GpchqA+o2=pchqAqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
6221.	ApchqB+o2=pchqBqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
6222.	CpchqB+o2=pchqBqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
6223.	DpchqB+o2=pchqBqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
6224.	EpchqB+o2=pchqBqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
6225.	FpchqB+o2=pchqBqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
6226.	GpchqB+o2=pchqBqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
6227.	ApchqC+o2=pchqCqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
6228.	BpchqC+o2=pchqCqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
6229.	DpchqC+o2=pchqCqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
6230.	EpchqC+o2=pchqCqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
6231.	FpchqC+o2=pchqCqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
6232.	GpchqC+o2=pchqCqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
6233.	ApchqD+o2=pchqDqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
6234.	BpchqD+o2=pchqDqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
6235.	CpchqD+o2=pchqDqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
6236.	EpchqD+o2=pchqDqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
6237.	FpchqD+o2=pchqDqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
6238.	GpchqD+o2=pchqDqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
6239.	ApchqE+o2=pchqEqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
6240.	BpchqE+o2=pchqEqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
6241.	CpchqE+o2=pchqEqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
6242.	DpchqE+o2=pchqEqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
6243.	FpchqE+o2=pchqEqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
6244.	GpchqE+o2=pchqEqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
6245.	HpchqE+o2=pchqEqjH	1.84E+45	-11.1	6538.0
6246.	IpchqE+o2=pchqEqjI	1.84E+45	-11.1	6538.0
6247.	ApchqF+o2=pchqFqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
6248.	BpchqF+o2=pchqFqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
6249.	CpchqF+o2=pchqFqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
6250.	DpchqF+o2=pchqFqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
6251.	EpchqF+o2=pchqFqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
6252.	GpchqF+o2=pchqFqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

6253.	HpchqF+o2=pchqFqjH	1.84E+45	-11.1	6538.0
6254.	IpchqF+o2=pchqFqjI	1.84E+45	-11.1	6538.0
6255.	ApchqG+o2=pchqGqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
6256.	BpchqG+o2=pchqGqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
6257.	CpchqG+o2=pchqGqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
6258.	DpchqG+o2=pchqGqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
6259.	EpchqG+o2=pchqGqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
6260.	FpchqG+o2=pchqGqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
6261.	pchqAqjB=pchoAqB+oh	3.34E+09	1.0	33500.0
6262.	pchqAqjC=pchoAqC+oh	5.75E+08	1.0	26000.0
6263.	pchqAqjD=pchoAqD+oh	9.89E+07	1.0	23000.0
6264.	pchqBqjA=pchoBqA+oh	1.67E+09	1.0	30500.0
6265.	pchqBqjC=pchoBqC+oh	1.67E+09	1.0	30500.0
6266.	pchqBqjD=pchoBqD+oh	2.87E+08	1.0	23000.0
6267.	pchqBqjE=pchoBqE+oh	3.06E+07	1.0	20645.3
6268.	pchqBqjE=DpchqBqE	1.04E+09	1.0	30145.3
6269.	pchqBqjE=FpchqBqE	2.07E+09	1.0	33145.3
6270.	pchqBqjE=GpchqBqE	2.14E+09	1.0	28226.6
6271.	pchqBqjE=HpchqBqE	3.45E+08	1.0	27305.9
6272.	pchqBqjE=IpchqBqE	2.14E+09	1.0	28226.6
6273.	pchqCqjA=pchoCqA+oh	2.87E+08	1.0	23000.0
6274.	pchqCqjB=pchoCqB+oh	1.67E+09	1.0	30500.0
6275.	pchqCqjD=pchoCqD+oh	1.67E+09	1.0	30500.0
6276.	pchqCqjE=pchoCqE+oh	1.78E+08	1.0	23645.3
6277.	pchqCqjF=pchoCqF+oh	1.84E+08	1.0	23226.6
6278.	pchqCqjE=DpchqCqE	1.04E+09	1.0	30145.3
6279.	pchqCqjE=FpchqCqE	2.07E+09	1.0	33145.3
6280.	pchqCqjE=GpchqCqE	2.14E+09	1.0	28226.6
6281.	pchqCqjE=HpchqCqE	3.45E+08	1.0	27305.9
6282.	pchqCqjE=IpchqCqE	2.14E+09	1.0	28226.6
6283.	pchqCqjF=DpchqCqF	1.07E+09	1.0	25226.6
6284.	pchqCqjF=EpchqCqF	2.07E+09	1.0	33145.3
6285.	pchqCqjF=GpchqCqF	2.07E+09	1.0	33145.3
6286.	pchqCqjF=HpchqCqF	2.14E+09	1.0	28226.6
6287.	pchqCqjF=IpchqCqF	3.45E+08	1.0	27305.9
6288.	pchqDqjF=CpchqDqF	3.68E+08	1.0	25226.6
6289.	pchqDqjF=HpchqDqF	2.14E+09	1.0	28226.6
6290.	pchqDqjB=EpchqDqB	1.22E+08	1.0	22645.3
6291.	pchqEqjA=pchoEqA+oh	5.27E+06	1.0	19645.3
6292.	pchqEqjB=pchoEqB+oh	3.06E+07	1.0	20645.3
6293.	pchqEqjC=pchoEqC+oh	1.78E+08	1.0	23645.3
6294.	pchqEqjD=pchoEqD+oh	1.04E+09	1.0	31145.3
6295.	pchqEqjF=pchoEqF+oh	1.04E+09	1.0	31145.3
6296.	pchqEqjI=pchoEqI+oh	1.07E+09	1.0	26226.6
6297.	pchqEqjG=pchoEqG+oh	1.07E+09	1.0	26226.6
6298.	pchqEqjH=pchoEqH+oh	1.73E+08	1.0	25305.9
6299.	pchqEqjG=DpchqEqG	1.71E+08	1.0	24305.9
6300.	pchqEqjG=FpchqEqG	2.07E+09	1.0	33145.3
6301.	pchqEqjG=HpchqEqG	2.07E+09	1.0	33145.3
6302.	pchqEqjG=IpchqEqG	2.14E+09	1.0	28226.6
6303.	pchqEqjH=CpchqEqH	3.68E+08	1.0	25226.6
6304.	pchqEqjH=DpchqEqH	1.08E+09	1.0	25226.6
6305.	pchqEqjH=FpchqEqH	2.14E+09	1.0	28226.6
6306.	pchqEqjI=BpchqEqI	6.13E+07	1.0	22645.3
6307.	pchqEqjI=CpchqEqI	3.56E+08	1.0	25645.3
6308.	pchqEqjI=GpchqEqI	2.14E+09	1.0	28226.6
6309.	pchqFqjA=pchoFqA+oh	5.43E+06	1.0	21226.6
6310.	pchqFqjB=pchoFqB+oh	3.16E+07	1.0	22226.6
6311.	pchqFqjC=pchoFqC+oh	1.84E+08	1.0	23226.6
6312.	pchqFqjD=pchoFqD+oh	1.07E+09	1.0	26226.6
6313.	pchqFqjI=pchoFqI+oh	1.71E+08	1.0	25305.9
6314.	pchqFqjH=pchoFqH+oh	1.07E+09	1.0	26226.6
6315.	pchqFqjE=pchoFqE+oh	1.04E+09	1.0	31145.3
6316.	pchqFqjG=pchoFqG+oh	1.04E+09	1.0	31145.3
6317.	pchqFqjD=ApchqDqF	1.48E+08	1.0	25000.0
6318.	pchqFqjD=BpchqDqF	5.75E+08	1.0	25000.0
6319.	pchqFqjD=GpchqDqF	3.43E+08	1.0	27305.9
6320.	pchqFqjD=HpchqDqF	2.14E+09	1.0	28226.6
6321.	pchqFqjH=DpchqFqH	1.07E+09	1.0	25226.6
6322.	pchqFqjH=CpchqFqH	3.68E+08	1.0	25226.6
6323.	pchqFqjH=EpchqFqH	2.07E+09	1.0	33645.3
	Declared duplicate reaction...			
6324.	pchqFqjH=EpchqFqH	3.43E+08	1.0	27305.9
	Declared duplicate reaction...			
6325.	pchqFqjI=BpchqEqH	6.13E+07	1.0	22645.3
6326.	pchqFqjI=CpchqEqH	3.56E+08	1.0	25645.3
6327.	pchqFqjI=GpchqEqH	2.14E+09	1.0	28226.6
6328.	pchqFqjI=IpchqEqH	2.14E+09	1.0	28226.6
6329.	pchqGqjD=pchoGqD+oh	1.71E+08	1.0	25305.9
6330.	pchqGqjE=pchoGqE+oh	1.07E+09	1.0	26226.6
6331.	pchqGqjF=pchoGqF+oh	1.04E+09	1.0	31145.3
6332.	pchqGqjE=BpchqEqG	6.13E+07	1.0	22645.3
6333.	pchqGqjE=CpchqEqG	3.56E+08	1.0	25645.3
6334.	pchqGqjE=IpchqEqG	2.14E+09	1.0	28226.6
6335.	Apche2+ho2=pche2ojA+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
6336.	Apche2+ho2=pche1ojC+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
6337.	Dpche2+ho2=pche2ojD+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
6338.	Dpche2+ho2=pche3ojB+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
6339.	Cpche4+ho2=pche4ojC+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
6340.	Cpche4+ho2=pche3ojE+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
6341.	Dpche5+ho2=pche5ojD+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
6342.	Dpche5+ho2=pche4ojF+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
6343.	Epche6+ho2=pche6ojE+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
6344.	Epche6+ho2=pche5ojG+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
6345.	Fpche7+ho2=pche7ojF+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
6346.	Apche2+ch3o2=pche2ojA+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6347.	Apche2+ch3o2=pche1ojC+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6348.	Dpche2+ch3o2=pche2ojD+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6349.	Dpche2+ch3o2=pche3ojB+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6350.	Cpche4+ch3o2=pche4ojC+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6351.	Cpche4+ch3o2=pche3ojE+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6352.	Dpche5+ch3o2=pche5ojD+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6353.	Dpche5+ch3o2=pche4ojF+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6354.	Epche6+ch3o2=pche6ojE+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

6355.	Epche6+ch3o2=pche5ojG+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6356.	Fpche7+ch3o2=pche7ojF+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6357.	Apche2+c2h5o2=pche2ojA+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6358.	Apche2+c2h5o2=pche1ojC+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6359.	Dpche2+c2h5o2=pche2ojD+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6360.	Dpche2+c2h5o2=pche3ojB+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6361.	Cpche4+c2h5o2=pche4ojC+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6362.	Cpche4+c2h5o2=pche3ojE+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6363.	Dpche5+c2h5o2=pche5ojD+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6364.	Dpche5+c2h5o2=pche4ojF+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6365.	Epche6+c2h5o2=pche6ojE+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6366.	Epche6+c2h5o2=pche5ojG+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6367.	Fpche7+c2h5o2=pche7ojF+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6368.	Apche2+nc3h7o2=pche2ojA+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6369.	Apche2+nc3h7o2=pche1ojC+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6370.	Dpche2+nc3h7o2=pche2ojD+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6371.	Dpche2+nc3h7o2=pche3ojB+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6372.	Cpche4+nc3h7o2=pche4ojC+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6373.	Cpche4+nc3h7o2=pche3ojE+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6374.	Dpche5+nc3h7o2=pche5ojD+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6375.	Dpche5+nc3h7o2=pche4ojF+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6376.	Epche6+nc3h7o2=pche6ojE+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6377.	Epche6+nc3h7o2=pche5ojG+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6378.	Fpche7+nc3h7o2=pche7ojF+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
6379.	Apche2+pchqjA=pche2ojA+pchojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
6380.	Apche2+pchqjA=pche1ojC+pchojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
6381.	Dpche2+pchqjA=pche2ojD+pchojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
6382.	Dpche2+pchqjA=pche3ojB+pchojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
6383.	Cpche4+pchqjA=pche4ojC+pchojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
6384.	Cpche4+pchqjA=pche3ojE+pchojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
6385.	Dpche5+pchqjA=pche5ojD+pchojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
6386.	Dpche5+pchqjA=pche4ojF+pchojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
6387.	Epche6+pchqjA=pche6ojE+pchojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
6388.	Epche6+pchqjA=pche5ojG+pchojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
6389.	Fpche7+pchqjA=pche7ojF+pchojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
6390.	Apche2+pchqjB=pche2ojA+pchojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
6391.	Apche2+pchqjB=pche1ojC+pchojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
6392.	Dpche2+pchqjB=pche2ojD+pchojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
6393.	Dpche2+pchqjB=pche3ojB+pchojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
6394.	Cpche4+pchqjB=pche4ojC+pchojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
6395.	Cpche4+pchqjB=pche3ojE+pchojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
6396.	Dpche5+pchqjB=pche5ojD+pchojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
6397.	Dpche5+pchqjB=pche4ojF+pchojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
6398.	Epche6+pchqjB=pche6ojE+pchojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
6399.	Epche6+pchqjB=pche5ojG+pchojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
6400.	Fpche7+pchqjB=pche7ojF+pchojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
6401.	Apche2+pchqjC=pche2ojA+pchojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
6402.	Apche2+pchqjC=pche1ojC+pchojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
6403.	Dpche2+pchqjC=pche2ojD+pchojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
6404.	Dpche2+pchqjC=pche3ojB+pchojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
6405.	Cpche4+pchqjC=pche4ojC+pchojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
6406.	Cpche4+pchqjC=pche3ojE+pchojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
6407.	Dpche5+pchqjC=pche5ojD+pchojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
6408.	Dpche5+pchqjC=pche4ojF+pchojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
6409.	Epche6+pchqjC=pche6ojE+pchojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
6410.	Epche6+pchqjC=pche5ojG+pchojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
6411.	Fpche7+pchqjC=pche7ojF+pchojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
6412.	Apche2+pchqjD=pche2ojA+pchojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
6413.	Apche2+pchqjD=pche1ojC+pchojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
6414.	Dpche2+pchqjD=pche2ojD+pchojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
6415.	Dpche2+pchqjD=pche3ojB+pchojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
6416.	Cpche4+pchqjD=pche4ojC+pchojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
6417.	Cpche4+pchqjD=pche3ojE+pchojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
6418.	Dpche5+pchqjD=pche5ojD+pchojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
6419.	Dpche5+pchqjD=pche4ojF+pchojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
6420.	Epche6+pchqjD=pche6ojE+pchojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
6421.	Epche6+pchqjD=pche5ojG+pchojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
6422.	Fpche7+pchqjD=pche7ojF+pchojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
6423.	Apche2+pchqjE=pche2ojA+pchojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
6424.	Apche2+pchqjE=pche1ojC+pchojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
6425.	Dpche2+pchqjE=pche2ojD+pchojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
6426.	Dpche2+pchqjE=pche3ojB+pchojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
6427.	Cpche4+pchqjE=pche4ojC+pchojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
6428.	Cpche4+pchqjE=pche3ojE+pchojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
6429.	Dpche5+pchqjE=pche5ojD+pchojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
6430.	Dpche5+pchqjE=pche4ojF+pchojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
6431.	Epche6+pchqjE=pche6ojE+pchojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
6432.	Epche6+pchqjE=pche5ojG+pchojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
6433.	Fpche7+pchqjE=pche7ojF+pchojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
6434.	Apche2+pchqjF=pche2ojA+pchojF	1.90E+12	0.0	-1200.0
6435.	Apche2+pchqjF=pche1ojC+pchojF	1.90E+12	0.0	-1200.0
6436.	Dpche2+pchqjF=pche2ojD+pchojF	1.90E+12	0.0	-1200.0
6437.	Dpche2+pchqjF=pche3ojB+pchojF	1.90E+12	0.0	-1200.0
6438.	Cpche4+pchqjF=pche4ojC+pchojF	1.90E+12	0.0	-1200.0
6439.	Cpche4+pchqjF=pche3ojE+pchojF	1.90E+12	0.0	-1200.0
6440.	Dpche5+pchqjF=pche5ojD+pchojF	1.90E+12	0.0	-1200.0
6441.	Dpche5+pchqjF=pche4ojF+pchojF	1.90E+12	0.0	-1200.0
6442.	Epche6+pchqjF=pche6ojE+pchojF	1.90E+12	0.0	-1200.0
6443.	Epche6+pchqjF=pche5ojG+pchojF	1.90E+12	0.0	-1200.0
6444.	Fpche7+pchqjF=pche7ojF+pchojF	1.90E+12	0.0	-1200.0
6445.	Apche2+pchqjG=pche2ojA+pchojG	1.90E+12	0.0	-1200.0
6446.	Apche2+pchqjG=pche1ojC+pchojG	1.90E+12	0.0	-1200.0
6447.	Dpche2+pchqjG=pche2ojD+pchojG	1.90E+12	0.0	-1200.0
6448.	Dpche2+pchqjG=pche3ojB+pchojG	1.90E+12	0.0	-1200.0
6449.	Cpche4+pchqjG=pche4ojC+pchojG	1.90E+12	0.0	-1200.0
6450.	Cpche4+pchqjG=pche3ojE+pchojG	1.90E+12	0.0	-1200.0
6451.	Dpche5+pchqjG=pche5ojD+pchojG	1.90E+12	0.0	-1200.0
6452.	Dpche5+pchqjG=pche4ojF+pchojG	1.90E+12	0.0	-1200.0
6453.	Epche6+pchqjG=pche6ojE+pchojG	1.90E+12	0.0	-1200.0
6454.	Epche6+pchqjG=pche5ojG+pchojG	1.90E+12	0.0	-1200.0
6455.	Fpche7+pchqjG=pche7ojF+pchojG	1.90E+12	0.0	-1200.0
6456.	Apche2+o2=pche1e3+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
6457.	Dpche2+o2=pche1e3+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
6458.	Dpche2+o2=pche2e4+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

6459.	Cpche4+o2=pche2e4+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
6460.	Cpche4+o2=pche3e5+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
6461.	Dpche5+o2=pche3e5+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
6462.	Dpche5+o2=pche4e6+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
6463.	Epche6+o2=pche4e6+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
6464.	Epche6+o2=pche5e7+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
6465.	Fpche7+o2=pche5e7+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
6466.	Apche2=>2c2h4+c5h7	2.00E+13	0.0	31230.0
6467.	Dpche2=>2c2h4+c5h7	2.00E+13	0.0	37620.0
6468.	Cpche4=>2c2h4+c5h7	2.00E+13	0.0	40410.0
6469.	Cpche4=ch3+eche1e3	2.00E+13	0.0	32800.0
6470.	Dpche5=c2h5+mche13	2.00E+13	0.0	31700.0
6471.	Dpche5=>2c2h4+c5h7	2.00E+13	0.0	38880.0
6472.	Epche6=>2c2h4+c5h7	2.00E+13	0.0	36210.0
6473.	Epche6=CHD13+nc3h7	2.00E+13	0.0	34000.0
6474.	Fpche7=>2c2h4+c5h7	2.00E+13	0.0	36800.0
6475.	Apche2=pche1e3+H	6.00E+12	0.0	41000.0
6476.	Dpche2=pche1e3+H	1.80E+13	0.0	46000.0
6477.	Dpche2=pche2e4+H	1.20E+13	0.0	43000.0
6478.	Cpche4=pche2e4+H	1.20E+13	0.0	41000.0
6479.	Cpche4=pche3e5+H	1.20E+13	0.0	56000.0
6480.	Dpche5=pche3e5+H	1.20E+13	0.0	57000.0
6481.	Dpche5=pche4e6+H	1.20E+13	0.0	45000.0
6482.	Epche6=pche4e6+H	6.00E+12	0.0	43000.0
6483.	Epche6=pche5e7+H	1.20E+13	0.0	46000.0
6484.	Fpche7=pche5e7+H	1.20E+13	0.0	46000.0
6485.	pche2ojA=ch2o+Aeche1	7.94E+14	0.0	19000.0
6486.	pche1ojC=c2h3+mchoA	7.94E+14	0.0	19000.0
6487.	pche1ojC=acrol+cyc6h11	7.94E+14	0.0	19000.0
6488.	pche2ojD=sc3h5+chxone	7.94E+14	0.0	19000.0
6489.	pche2ojD=>sc3h5+2c2h4+ch2co	7.94E+14	0.0	19000.0
6490.	pche3ojB=ch3hco+Amche1	7.94E+14	0.0	19000.0
6491.	pche3ojB=ch3+eche2oA	7.94E+14	0.0	19000.0
6492.	pche4ojC=ethco+cyc6h9	7.94E+14	0.0	19000.0
6493.	pche4ojC=c2h5+mche2oA	7.94E+14	0.0	19000.0
6494.	pche3ojE=>2c2h4+c2h5+propynal	7.94E+14	0.0	19000.0
6495.	pche5ojD=nc3h7+chxe2oA	7.94E+14	0.0	19000.0
6496.	pche4ojF=>nc3h7+c2h4+c3h3hco	7.94E+14	0.0	19000.0
6497.	pche6ojE=>c5h10+c3h4hco	7.94E+14	0.0	19000.0
6498.	pche5ojG=>c2h4+c2h5+VINacrol	7.94E+14	0.0	19000.0
6499.	pche7ojF=>c5h10+c3h4hco	7.94E+14	0.0	19000.0
6500.	pchoAojB+oh=pchoAqB	1.81E+13	0.0	0.0
6501.	pchoAojC+oh=pchoAqC	1.81E+13	0.0	0.0
6502.	pchoAojD+oh=pchoAqD	1.81E+13	0.0	0.0
6503.	pchoBojA+oh=pchoBqA	1.81E+13	0.0	0.0
6504.	pchoBojC+oh=pchoBqC	1.81E+13	0.0	0.0
6505.	pchoBojD+oh=pchoBqD	1.81E+13	0.0	0.0
6506.	pchoBojE+oh=pchoBqE	1.81E+13	0.0	0.0
6507.	pchoCojA+oh=pchoCqA	1.81E+13	0.0	0.0
6508.	pchoCojB+oh=pchoCqB	1.81E+13	0.0	0.0
6509.	pchoCojD+oh=pchoCqD	1.81E+13	0.0	0.0
6510.	pchoCojE+oh=pchoCqE	1.81E+13	0.0	0.0
6511.	pchoCojF+oh=pchoCqF	1.81E+13	0.0	0.0
6512.	pchoEojA+oh=pchoEqA	1.81E+13	0.0	0.0
6513.	pchoEojB+oh=pchoEqB	1.81E+13	0.0	0.0
6514.	pchoEojC+oh=pchoEqC	1.81E+13	0.0	0.0
6515.	pchoEojD+oh=pchoEqD	1.81E+13	0.0	0.0
6516.	pchoEojF+oh=pchoEqF	1.81E+13	0.0	0.0
6517.	pchoEojI+oh=pchoEqI	1.81E+13	0.0	0.0
6518.	pchoEojG+oh=pchoEqG	1.81E+13	0.0	0.0
6519.	pchoEojH+oh=pchoEqH	1.81E+13	0.0	0.0
6520.	pchoFojA+oh=pchoFqA	1.81E+13	0.0	0.0
6521.	pchoFojB+oh=pchoFqB	1.81E+13	0.0	0.0
6522.	pchoFojC+oh=pchoFqC	1.81E+13	0.0	0.0
6523.	pchoFojD+oh=pchoFqD	1.81E+13	0.0	0.0
6524.	pchoFojI+oh=pchoFqI	1.81E+13	0.0	0.0
6525.	pchoFojH+oh=pchoFqH	1.81E+13	0.0	0.0
6526.	pchoFojE+oh=pchoFqE	1.81E+13	0.0	0.0
6527.	pchoFojG+oh=pchoFqG	1.81E+13	0.0	0.0
6528.	pchoGojD+oh=pchoGqD	1.81E+13	0.0	0.0
6529.	pchoGojE+oh=pchoGqE	1.81E+13	0.0	0.0
6530.	pchoGojF+oh=pchoGqF	1.81E+13	0.0	0.0
6531.	hco+echoA=pchoAojB	1.32E+04	2.5	6130.0
6532.	ch2hco+mchoA=pchoAojC	1.00E+11	0.0	3496.0
6533.	hcoch2hco+cyc6h11=pchoAojC	2.00E+11	0.0	3496.0
6534.	chxone+ch2ch2hco=pchoAojD	5.00E+10	0.0	3457.0
6535.	ch2o+echoyA=pchoBojA	3.39E+08	0.0	2490.0
6536.	ch3co+mchoA=pchoBojC	1.32E+04	2.5	6130.0
6537.	chxone+ch2coch3=pchoBojD	5.00E+10	0.0	3457.0
6538.	Fc9oAoH=pchoBojE	1.00E+08	0.9	5900.0
6539.	ch3co+c7e6oA=Fc9oAoH	2.00E+11	0.0	2010.0
6540.	c5e4oB+ch2ch2ch2hco=Fc9oAoH	1.32E+04	2.5	6130.0
6541.	MeEc8e1oIqG+oh=GpchqBqE	4.76E+07	1.5	34700.0
6542.	MeEc8e1oIojG+oh=MeEc8e1oIqG	1.81E+13	0.0	0.0
6543.	ch3hco+MeEc6e1oGrF=MeEc8e1oIojG	5.00E+10	0.0	3457.0
6544.	acrol+Dc4h7-1=MeEc6e1oGrF	1.32E+04	2.5	6130.0
6545.	Ac7oBoG=ch2co+c2h4+ch2ch2hco	2.00E+13	0.0	34130.0
6546.	Ac7oBoG+o2=c7oBoGqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
6547.	c7oBoGqjA=Cc7oBoGqA	5.75E+08	1.0	22000.0
6548.	c7oBoGqjA=Dc7oBoGqA	9.89E+07	1.0	22000.0
6549.	Cc7oBoGqA+o2=c7oBoGqAqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
6550.	Dc7oBoGqA+o2=c7oBoGqAqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
6551.	c7oBoGqAqjC=oh+c7oAoBoGqC	5.75E+08	1.0	23000.0
6552.	c7oBoGqAqjD=oh+c7oAoBoGqD	9.89E+07	1.0	20000.0
6553.	c7oAoBoGqC=oh+choco+c5oAoE	1.00E+16	0.0	43000.0
6554.	c7oAoBoGqD=oh+ch2co+hco+choch2ch2cho	1.00E+16	0.0	43000.0
6555.	Fc9e1qEqH=HpchqBqE	1.00E+08	0.9	5900.0
6556.	ho2+c9e1e5qH=Fc9e1qEqH	1.00E+11	0.0	7600.0
6557.	Fc9e1qEqH=oh+ch3hco+c7e1e6qC	5.00E+13	0.0	25500.0
6558.	c9e1e5ojH+oh=c9e1e5qH	1.81E+13	0.0	0.0
6559.	ch3hco+Cc7h11-16=c9e1e5ojH	5.00E+10	0.0	3457.0
6560.	ac3h5+c4h6=Cc7h11-16	8.80E+03	2.5	6130.0
6561.	c7e1e6ojC+oh=c7e1e6qC	1.81E+13	0.0	0.0
6562.	Dc4h7-1+acrol=c7e1e6ojC	5.00E+10	0.0	3457.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

6563.	c9e5oAqH+oh=IpchqBqE	4.76E+07	1.5	34700.0
6564.	c9e5oAojH+oh=c9e5oAqH	1.81E+13	0.0	0.0
6565.	ch3hco+Ec7e6oA=c9e5oAojH	5.00E+10	0.0	3457.0
6566.	c4h6+ch2ch2hco=Ec7e6oA	1.32E+04	2.5	6130.0
6567.	pche4qB+ho2=DpchqBqE	8.00E+10	0.0	6000.0
6568.	pche4ojB+oh=pche4qB	1.81E+13	0.0	0.0
6569.	ch3hco+Cmche1=pche4ojB	5.00E+10	0.0	3457.0
6570.	DpchqBqE=oh+mche1qC+ch3hco	5.00E+13	0.0	25500.0
6571.	mche1ojC+oh=mche1qC	1.81E+13	0.0	0.0
6572.	c2h4+ch2ccho=MeBc4e1oErD	2.00E+11	0.0	2010.0
6573.	ac3h4+ch2ch2ch2hco=mche1ojC	2.00E+11	0.0	11300.0
6574.	c2h4+MeBc4e1oErD=mche1ojC	1.32E+04	2.5	6130.0
6575.	ch2ccho+o2=ch2co+oh+co	2.51E+10	0.0	0.0
6576.	ch2ccho=c2h3co	2.50E+12	0.0	47000.0
6577.	ch2ccho+o2=ch2o+choco	5.01E+12	0.0	19000.0
6578.	ch2ccho+O=ch2co+hco	1.81E+14	0.0	0.0
6579.	ch2ccho+ho2=oh+ch2co+hco	2.00E+13	0.0	0.0
6580.	acrol+oh=ch2ccho+h2o	1.11E+06	2.0	1450.0
6581.	acrol+ho2=ch2ccho+h2o2	3.00E+09	0.0	9930.0
6582.	pche5qB+ho2=FpchqBqE	8.00E+10	0.0	6000.0
6583.	pche5ojB+oh=pche5qB	1.81E+13	0.0	0.0
6584.	ch3hco+Amche3=pche5ojB	5.00E+10	0.0	3457.0
6585.	Gc7e1e3=Amche3	1.00E+08	0.9	5900.0
6586.	c2h4+c5h7=Gc7e1e3	8.80E+03	2.5	6130.0
6587.	Fc9e1qAqH=FpchqBqE	1.00E+08	0.9	5900.0
6588.	Fc9e1qAqH=oh+c7e1e6qA+ch3hco	5.00E+13	0.0	25500.0
6589.	Bc7e6oA+oh=c7e1e6qA	1.81E+13	0.0	0.0
6590.	Dc4h7-1+acrol=Bc7e6oA	1.32E+04	2.5	6130.0
6591.	ch2o+AechoB=pchoCojA	5.00E+10	0.0	3457.0
6592.	ch3hco+chxco=pchoCojB	1.32E+04	2.5	6130.0
6593.	chxone+c2h5co=pchoCojD	1.32E+04	2.5	6130.0
6594.	Fc9oAoG=pchoCojE	1.00E+08	0.9	5900.0
6595.	ch2ch2ch2hco+etvinket=Fc9oAoG	1.32E+04	2.5	6130.0
6596.	c2h5+c7e1oAoG=Fc9oAoG	1.32E+04	2.5	6130.0
6597.	c7e1oAoG+oh=c7e1oAoyG+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
6598.	c7e1oAoG+H=c7e1oAoyG+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
6599.	c7e1oAoG+ho2=c7e1oAoyG+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
6600.	c7e1oAoyG=co+Fc6e1oA	2.00E+13	0.0	28700.0
6601.	c7e1oAoyG+ho2=oh+co2+Fc6e1oA	2.00E+13	0.0	0.0
6602.	c2h4+Dc4e1oA=Fc6e1oA	1.32E+04	2.5	6130.0
6603.	c2h4+hcco=Dc4e1oA	1.32E+04	2.5	6130.0
6604.	MeEc8oAoFrI=pchoCojF	1.00E+08	0.9	5900.0
6605.	c6e5oA+c2h5co=MeEc8oAoFrI	1.32E+04	2.5	6130.0
6606.	ch2ch2ch2hco+etvinket=MeEc8oAoFrI	1.32E+04	2.5	6130.0
6607.	oh+MeEc8e1oIqF=GpchqCqE	4.76E+07	1.5	34700.0
6608.	oh+MeEc8e1oIojF=MeEc8e1oIqF	1.81E+13	0.0	0.0
6609.	ethco+Bc6e5oA=MeEc8e1oIojF	1.00E+11	0.0	11900.0
6610.	acrol+ac3h5=Bc6e5oA	8.50E+10	0.0	11300.0
6611.	IpchqCqE=oh+chxe1qC+ethco	5.00E+13	0.0	25500.0
6612.	oh+chxe1ojC=chxe1qC	1.81E+13	0.0	0.0
6613.	Fc6e2oA=chxe1ojC	1.00E+08	0.9	5900.0
6614.	Fc6e5oA=chxe1ojC	1.00E+08	0.9	5900.0
6615.	c2h4+c3h4hco=Fc6e2oA	8.80E+03	2.5	6130.0
6616.	c3h4hco+ho2=oh+acrol+hco	1.00E+13	0.0	0.0
6617.	c3h4hco+ho2=oh+ch2o+chchhco	1.00E+13	0.0	0.0
6618.	c3h4hco+o2=ch2hco+chocho	1.23E+36	-7.2	33600.0
6619.	chchhco=c2h3co	1.40E+09	1.0	32100.0
6620.	c2h2+hco=chchhco	7.77E+06	1.4	7755.0
6621.	chchhco+o2=chocho+hco	5.42E+12	0.0	0.0
6622.	oh+c9e5oAqG=IpchqCqE	4.76E+07	1.5	34700.0
6623.	oh+c9e5oAojG=c9e5oAqG	1.81E+13	0.0	0.0
6624.	ethco+Fc6e5oA=c9e5oAojG	3.39E+08	0.0	2490.0
6625.	c2h5+c7e2oAoG=c9e5oAojG	5.00E+10	0.0	3457.0
6626.	c7e2oAoG+oh=c7e2oAoyG+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
6627.	c7e2oAoG+H=c7e2oAoyG+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
6628.	c7e2oAoG+ho2=c7e2oAoyG+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
6629.	c7e2oAoyG=co+Fc6e2oA	2.00E+13	0.0	28700.0
6630.	c7e2oAoyG+ho2=>oh+co2+Fc6e2oA	2.00E+13	0.0	0.0
6631.	c7e2oAoG+oh=c7e2oyAoG+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
6632.	c7e2oAoG+H=c7e2oyAoG+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
6633.	c7e2oAoG+ho2=c7e2oyAoG+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
6634.	c7e2oyAoG=co+Fc6e5oA	3.04E+14	-0.5	30510.0
6635.	c7e2oyAoG+ho2=>oh+co2+Fc6e5oA	2.00E+13	0.0	0.0
6636.	Fc9e1qEqG=HpchqCqE	1.00E+08	0.9	5900.0
6637.	ho2+c9e1e6qE=Fc9e1qEqG	8.00E+10	0.0	6000.0
6638.	ho2+c9e1e5qG=Fc9e1qEqG	8.00E+10	0.0	6000.0
6639.	oh+c9e1e6ojE=c9e1e6qE	1.81E+13	0.0	0.0
6640.	oh+c9e1e5ojG=c9e1e5qG	1.81E+13	0.0	0.0
6641.	c2h5+c7e2e6oA=c9e1e5ojG	5.00E+10	0.0	3457.0
6642.	ethco+Ac6h9-15=c9e1e5ojG	1.00E+10	0.0	20000.0
6643.	Dc4h7-1+c5e2oA=c9e1e6ojE	5.00E+10	0.0	3457.0
6644.	Ac4h7-1+c4h7hco-1=c9e1e6ojE	1.00E+10	0.0	20000.0
6645.	EtDc7e1qEqHrI=HpchqCqE	1.00E+08	0.9	5900.0
6646.	EtDc7e1e8qE+ho2=EtDc7e1qEqHrI	8.00E+10	0.0	6000.0
6647.	EtDc7e1e8ojE+oh=EtDc7e1e8qE	1.81E+13	0.0	0.0
6648.	ethco+c6h9=EtDc7e1e8ojE	5.00E+10	0.0	9600.0
6649.	c7e2e6oA+oh=c7e2e6oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
6650.	c7e2e6oA+H=c7e2e6oyA+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
6651.	c7e2e6oA+ho2=c7e2e6oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
6652.	c7e2e6oyA=co+Ac6h9-15	3.04E+14	-0.5	30510.0
6653.	c5e2oA+oh=c5e2oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
6654.	c5e2oA+H=c5e2oyA+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
6655.	c5e2oA+ho2=c5e2oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
6656.	c5e2oyA=co+Ac4h7-1	3.04E+14	-0.5	30510.0
6657.	ho2+pche3qF=DpchqCqF	8.00E+10	0.0	6000.0
6658.	oh+pche3ojF=pche3qF	1.81E+13	0.0	0.0
6659.	MeEc8e5oArI=pche3ojF	1.00E+08	0.9	5900.0
6660.	ch3+MeEc7e6e8oA=MeEc8e5oArI	1.32E+04	2.5	6130.0
6661.	EtDc7e4oIrA=pche3ojF	1.00E+08	0.9	5900.0
6662.	c2h4+MeCc6e3oArG=EtDc7e4oIrA	8.50E+10	0.0	11300.0
6663.	ch3+MeCc5e4e5oA=MeCc6e3oArG	1.32E+04	2.5	6130.0
6664.	oh+MeEc8e8oAqF=DpchqCqF	4.76E+07	1.5	34700.0
6665.	oh+MeEc8e8oAojF=MeEc8e8oAqF	1.81E+13	0.0	0.0
6666.	ethco+Ec6e5oA=MeEc8e8oAojF	3.39E+08	0.0	2490.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

6667.	c2h5+MeBc6e7oAoF=MeEc8e8oAojF	5.00E+10	0.0	3457.0
6668.	ac3h4+ch2ch2hco=Ec6e5oA	2.00E+11	0.0	11300.0
6669.	MeEc7e6e8oA+oh=h2o+MeEc7e6e8oyA	4.20E+12	0.0	500.0
6670.	MeEc7e6e8oA+H=H2+MeEc7e6e8oyA	4.00E+13	0.0	4200.0
6671.	MeEc7e6e8oA+ho2=h2o2+MeEc7e6e8oyA	1.00E+12	0.0	10000.0
6672.	MeEc7e6e8oyA=co+MeCc6e1e7rF	2.00E+13	0.0	28700.0
6673.	c2h4+ISOPY=MeCc6e1e7rF	8.50E+10	0.0	11300.0
6674.	MeCc5e4e5oA+oh=h2o+MeCc5e4e5oyA	4.20E+12	0.0	500.0
6675.	MeCc5e4e5oA+H=H2+MeCc5e4e5oyA	4.00E+13	0.0	4200.0
6676.	MeCc5e4e5oA+ho2=h2o2+MeCc5e4e5oyA	1.00E+12	0.0	10000.0
6677.	MeCc5e4e5oyA=co+ISOPY	2.00E+13	0.0	28700.0
6678.	MeBc6e7oAoF+oh=h2o+MeBc6e7oyAoF	4.20E+12	0.0	500.0
6679.	MeBc6e7oAoF+H=H2+MeBc6e7oyAoF	4.00E+13	0.0	4200.0
6680.	MeBc6e7oAoF+ho2=h2o2+MeBc6e7oyAoF	1.00E+12	0.0	10000.0
6681.	MeBc6e7oyAoF=co+Ec6e5oA	3.04E+14	-0.5	30510.0
6682.	MeBc6e7oAoF+oh=h2o+MeBc6e7oAoyF	4.20E+12	0.0	500.0
6683.	MeBc6e7oAoF+H=H2+MeBc6e7oAoyF	4.00E+13	0.0	4200.0
6684.	MeBc6e7oAoF+ho2=h2o2+MeBc6e7oAoyF	1.00E+12	0.0	10000.0
6685.	MeBc6e7oAoyF=co+MeBc5e6oArE	2.00E+13	0.0	28700.0
6686.	c2h4+ic3h4hco=MeBc5e6oArE	8.50E+10	0.0	11300.0
6687.	ac3h4+hco=ic3h4hco	1.76E+04	2.5	6130.0
6688.	oh+EtDc7e1oIqE=HpchqCqF	4.76E+07	1.5	34700.0
6689.	oh+EtDc7e1oIojE=EtDc7e1oIqE	1.81E+13	0.0	0.0
6690.	ethco+Cc6e5oA=EtDc7e1oIojE	1.00E+11	0.0	11900.0
6691.	c2h5+MeCc6e5oAoG=EtDc7e1oIojE	3.33E+10	0.0	6397.0
6692.	c2h3+ac3h5hco=Cc6e5oA	2.00E+11	0.0	2010.0
6693.	hco+c5h8-14=Cc6e5oA	1.32E+04	2.5	6130.0
6694.	MeCc6e5oAoG+oh=h2o+MeCc6e5oyAoG	4.20E+12	0.0	500.0
6695.	MeCc6e5oAoG+H=H2+MeCc6e5oyAoG	4.00E+13	0.0	4200.0
6696.	MeCc6e5oAoG+ho2=h2o2+MeCc6e5oyAoG	1.00E+12	0.0	10000.0
6697.	MeCc6e5oyAoG=co+MeBc5e4oArF	2.00E+13	0.0	28700.0
6698.	acrol+ac3h5=MeBc5e4oArF	1.00E+11	0.0	11900.0
6699.	MeCc6e5oAoG+oh=h2o+MeCc6e5oAoyG	4.20E+12	0.0	500.0
6700.	MeCc6e5oAoG+H=H2+MeCc6e5oAoyG	4.00E+13	0.0	4200.0
6701.	MeCc6e5oAoG+ho2=h2o2+MeCc6e5oAoyG	1.00E+12	0.0	10000.0
6702.	MeCc6e5oAoyG=co+Cc6e5oA	2.00E+13	0.0	28700.0
6703.	ch2o+AechoD=pchoEojA	5.00E+10	0.0	3457.0
6704.	ch3hco+AmchoC=pchoEojB	3.33E+10	0.0	6397.0
6705.	ethco+Bchxone=pchoEojC	5.00E+10	0.0	9043.0
6706.	c2h5+mchoAoC=pchoEojC	3.33E+10	0.0	6397.0
6707.	c2h4+Bchxone=AechoD	1.32E+04	2.5	6130.0
6708.	c9oyAoF=pchoEojD	1.00E+08	0.9	5900.0
6709.	MeEc8oAoyI=pchoEojF	1.00E+08	0.9	5900.0
6710.	EtDc7oAoHrI=pchoEojG	1.00E+08	0.9	5900.0
6711.	ch2co+Dc7oA=EtDc7oAoHrI	1.76E+04	2.5	6130.0
6712.	c5h10+ch2hco=Dc7oA	8.80E+03	2.5	6130.0
6713.	c2h5+c4h7hco-1=Dc7oA	8.80E+03	2.5	6130.0
6714.	EtDc7oAoCrI=pchoEojG	1.00E+08	0.9	5900.0
6715.	c2h4+Dc7oAoC=EtDc7oAoCrI	1.32E+04	2.5	6130.0
6716.	c2h5+c5e4oAoC=Dc7oAoC	8.80E+03	2.5	6130.0
6717.	c3h7chco+ch2hco=Dc7oAoC	1.76E+04	2.5	6130.0
6718.	c5e4oAoC+oh=h2o+c5e4oyAoC	4.20E+12	0.0	500.0
6719.	c5e4oAoC+H=H2+c5e4oyAoC	4.00E+13	0.0	4200.0
6720.	c5e4oAoC+ho2=h2o2+c5e4oyAoC	1.00E+12	0.0	10000.0
6721.	c5e4oyAoC=co+ch2coc2h3	2.00E+13	0.0	28700.0
6722.	c5e4oyAoC+ho2=>ch2coc2h3+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
6723.	MeEc8oAoDrI=pchoEojH	1.00E+08	0.9	5900.0
6724.	EtDc7oCoIrA=pchoEojH	1.00E+08	0.9	5900.0
6725.	c2h4+c6alCco=EtDc7oCoIrA	2.11E+11	0.0	7350.0
6726.	c5h10+choch2ch2co=MeEc8oAoDrI	1.00E+11	0.0	9800.0
6727.	nc3h7+c6e5oAo4=MeEc8oAoDrI	1.50E+11	0.0	7200.0
6728.	c6alCco=Cc6oA+co	2.00E+13	0.0	28700.0
6729.	c6alCco+ho2=>Cc6oA+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
6730.	c6e5oAo4+oh=c6e5oyAo4+h2o	2.30E+10	0.7	-1100.0
6731.	c6e5oAo4+H=c6e5oyAo4+H2	4.10E+09	1.2	2405.0
6732.	c6e5oAo4+ho2=c6e5oyAo4+h2o2	3.00E+12	0.0	12000.0
6733.	c6e5oAo4+ch3=c6e5oyAo4+ch4	7.60E+00	3.4	3740.0
6734.	c6e5oAo4+o2=c6e5oyAo4+ho2	3.00E+13	0.0	39200.0
6735.	c6e5oyAo4=c2h3coc2h4+co	2.00E+13	0.0	28700.0
6736.	c6e5oyAo4+ho2=>c2h3coc2h4+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
6737.	Fc9oAoE=pchoEojI	1.00E+08	0.9	5900.0
6738.	MeEc8oDoIrA=pchoEojI	1.00E+08	0.9	5900.0
6739.	c2h5+c7e6oAoE=Fc9oAoE	1.50E+11	0.0	7200.0
6740.	c7e6oAoE+oh=c7e6oyAoE+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
6741.	c7e6oAoE+H=c7e6oyAoE+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
6742.	c7e6oAoE+ho2=c7e6oyAoE+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
6743.	c7e6oyAoE=Fc6e1oC+co	2.00E+13	0.0	28700.0
6744.	c7e6oyAoE+ho2=>Fc6e1oC+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
6745.	c2h4+ch2coc2h3=Fc6e1oC	2.64E+04	2.5	6130.0
6746.	c2h4+MeCc6oBoGrA=MeEc8oDoIrA	3.30E+11	0.0	7200.0
6747.	ch2co+Bc5oA=MeCc6oBoGrA	2.11E+11	0.0	7350.0
6748.	c3h6+AchxqBqD=BpchqEqG	8.80E+03	2.5	6130.0
6749.	ho2+chxe1qD=AchxqBqD	8.00E+10	0.0	6000.0
6750.	chxe1ojD+oh=chxe1qD	1.81E+13	0.0	0.0
6751.	c4h6+ch2hco=chxe1ojD	1.32E+04	2.5	6130.0
6752.	c2h4+ac3h4hco1=chxe1ojD	2.00E+11	0.0	2010.0
6753.	c2h2+ch2hco=ac3h4hco1	7.77E+06	1.4	7755.0
6754.	oh+c9e6oAqC=CpchqEqG	4.76E+07	1.5	34700.0
6755.	oh+c9e6oAojC=c9e6oAqC	1.81E+13	0.0	0.0
6756.	hcoch2hco+Ac6h11-3=c9e6oAojC	3.33E+10	0.0	6397.0
6757.	ch2hco+c7e4oA=c9e6oAojC	3.33E+10	0.0	6397.0
6758.	c7e4oA+oh=c7e4oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
6759.	c7e4oA+H=c7e4oyA+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
6760.	c7e4oA+ho2=c7e4oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
6761.	c7e4oyA=Ac6h11-3+co	2.80E+13	0.0	28700.0
6762.	c7e4oyA+ho2=>Ac6h11-3+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
6763.	oh+EtDc7e9oAqC=IpchqEqG	4.76E+07	1.5	34700.0
6764.	oh+c9e5oAqC=IpchqEqG	4.76E+07	1.5	34700.0
6765.	oh+EtDc7e9oAojC=EtDc7e9oAqC	1.81E+13	0.0	0.0
6766.	oh+c9e5oAojC=c9e5oAqC	1.81E+13	0.0	0.0
6767.	hcoch2hco+Cc6h11-1=EtDc7e9oAojC	6.66E+10	0.0	6397.0
6768.	ch2hco+MeCc6e1oG=EtDc7e9oAojC	3.33E+10	0.0	6397.0
6769.	hcoch2hco+Cc6h11-1=c9e5oAojC	6.66E+10	0.0	6397.0
6770.	ch2hco+c7e3oA=c9e5oAojC	3.33E+10	0.0	6397.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

6771.	MeCc6e1oG+oh=h2o+MeCc6e1oyG	4.20E+12	0.0	500.0
6772.	MeCc6e1oG+H=H2+MeCc6e1oyG	4.00E+13	0.0	4200.0
6773.	MeCc6e1oG+ho2=h2o2+MeCc6e1oyG	1.00E+12	0.0	10000.0
6774.	MeCc6e1oyG=co+Cc6h11-1	2.00E+13	0.0	28700.0
6775.	c7e3oA+oh=h2o+c7e3oyA	4.20E+12	0.0	500.0
6776.	c7e3oA+H=H2+c7e3oyA	4.00E+13	0.0	4200.0
6777.	c7e3oA+ho2=h2o2+c7e3oyA	1.00E+12	0.0	10000.0
6778.	c7e3oyA=co+Cc6h11-1	2.00E+13	0.0	28700.0
6779.	c3h6+BchxqAqD=BpchqEqH	8.80E+03	2.5	6130.0
6780.	chxe1qD+ho2=BchxqAqD	8.00E+10	0.0	6000.0
6781.	oh+c9e6oAqD=CpchqEqH	4.76E+07	1.5	34700.0
6782.	oh+c9e6oAojD=c9e6oAqD	1.81E+13	0.0	0.0
6783.	choch2ch2cho+Cc5h9-1=c9e6oAojD	5.00E+10	0.0	9600.0
6784.	ch2ch2hco+c6e3oA=c9e6oAojD	3.33E+10	0.0	6397.0
6785.	ho2+pche4qH=DpchqEqH	8.00E+10	0.0	6000.0
6786.	oh+pche4ojH=pche4qH	1.81E+13	0.0	0.0
6787.	MeEc8e9oArD=pche4ojH	1.00E+08	0.9	5900.0
6788.	ch2hco+P2c4h513=MeEc8e9oArD	1.32E+04	2.5	6130.0
6789.	ho2+pche5qH=FpchqEqH	8.00E+10	0.0	6000.0
6790.	ho2+pche6qI=GpchqEqH	8.00E+10	0.0	6000.0
6791.	oh+pche6ojI=pche6qI	1.81E+13	0.0	0.0
6792.	c4h6+Bc5oA=pche6ojI	2.64E+04	2.5	6130.0
6793.	ho2+pche5qI=IpchqEqH	8.00E+10	0.0	6000.0
6794.	oh+pche5ojI=pche5qI	1.81E+13	0.0	0.0
6795.	Fc9e4oA=pche5ojI	1.00E+08	0.9	5900.0
6796.	ch2ch2hco+c6h10-13=Fc9e4oA	1.32E+04	2.5	6130.0
6797.	c7e4e6oA+c2h5=Fc9e4oA	1.32E+04	2.5	6130.0
6798.	c7e4e6oA+oh=h2o+c7e4e6oyA	4.20E+12	0.0	500.0
6799.	c7e4e6oA+H=H2+c7e4e6oyA	4.00E+13	0.0	4200.0
6800.	c7e4e6oA+ho2=h2o2+c7e4e6oyA	1.00E+12	0.0	10000.0
6801.	c7e4e6oyA=co+Fc6h9-13	2.00E+13	0.0	28700.0
6802.	c3h6+BchxqAqC=BpchqEqI	8.80E+03	2.5	6130.0
6803.	ho2+chxe1qC=BchxqAqC	8.00E+10	0.0	6000.0
6804.	oh+c9e6oAqE=CpchqEqI	4.76E+07	1.5	34700.0
6805.	oh+c9e6oAojE=c9e6oAqE	1.81E+13	0.0	0.0
6806.	ch2ch2ch2hco+c5e2oA=c9e6oAojE	3.33E+10	0.0	6397.0
6807.	oh+MeEc8e1oIqD=GpchqEqI	4.76E+07	1.5	34700.0
6808.	oh+MeEc8e1oIojD=MeEc8e1oIqD	1.81E+13	0.0	0.0
6809.	ac3h5hco+Bc5oA=MeEc8e1oIojD	5.00E+10	0.0	9600.0
6810.	ch2o+AechoE=pchoFojA	5.00E+10	0.0	3457.0
6811.	Cchxone+c2h4=AechoE	1.32E+04	2.5	6130.0
6812.	ch3hco+AmchoD=pchoFojB	3.33E+10	0.0	6397.0
6813.	ethco+Cchxone=pchoFojC	3.33E+10	0.0	6397.0
6814.	c2h5+mchoAoD=pchoFojC	3.33E+10	0.0	6397.0
6815.	mchoAoD+oh=h2o+mchoyAoD	4.20E+12	0.0	500.0
6816.	mchoAoD+H=H2+mchoyAoD	4.00E+13	0.0	4200.0
6817.	mchoAoD+ho2=h2o2+mchoyAoD	1.00E+12	0.0	10000.0
6818.	mchoyAoD=co+Cchxone	2.00E+13	0.0	28700.0
6819.	mchoyAoD+ho2=>oh+co2+Cchxone	2.00E+13	0.0	0.0
6820.	nc3h7+chxoAoC=pchoFojD	2.50E+10	0.0	10090.0
6821.	Ac9oDoF=pchoFojD	1.00E+08	0.9	5900.0
6822.	Ac7oBoD+c2h4=Ac9oDoF	1.32E+04	2.5	6130.0
6823.	ch2co+Ac5oB=Ac7oBoD	1.76E+04	2.5	6130.0
6824.	chxoAoC+oh=BchxoAoC+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
6825.	chxoAoC+H=BchxoAoC+H2	2.70E+07	2.0	5000.0
6826.	chxoAoC+ho2=BchxoAoC+h2o2	1.20E+12	0.0	15500.0
6827.	chxoAoC+oh=DchxoAoC+h2o	1.56E+07	2.0	-765.0
6828.	chxoAoC+H=DchxoAoC+H2	5.40E+07	2.0	5000.0
6829.	chxoAoC+ho2=DchxoAoC+h2o2	2.40E+12	0.0	15500.0
6830.	BchxoAoC+O=c6oAoCoyF	2.00E+14	0.0	0.0
6831.	BchxoAoC+ho2=oh+c6oAoCoyF	1.00E+13	0.0	0.0
6832.	BchxoAoC+o2=co2+Ec5oAoB	1.23E+36	-7.2	33600.0
6833.	c6oAoCoyF=co+Ec5oAoB	2.00E+13	0.0	28700.0
6834.	c2h4+ch2cohco=Ec5oAoB	1.32E+04	2.5	6130.0
6835.	Fc6e1oCoE=DchxoAoC	1.00E+08	0.9	5900.0
6836.	ch2co+ch2coc2h3=Fc6e1oCoE	1.76E+04	2.5	6130.0
6837.	MeEc8oyAoI=pchoFojE	1.00E+08	0.9	5900.0
6838.	EtDc7oAoyI=pchoFojG	1.00E+08	0.9	5900.0
6839.	MeEc8oAoCrI=pchoFojH	1.00E+08	0.9	5900.0
6840.	EtDc7oBoIrA=pchoFojH	1.00E+08	0.9	5900.0
6841.	nc3h7+c6e5oAoC=MeEc8oAoCrI	1.50E+11	0.0	7200.0
6842.	c6e5oAoC+oh=c6e5oyAoC+h2o	2.30E+10	0.7	-1100.0
6843.	c6e5oAoC+H=c6e5oyAoC+H2	4.10E+09	1.2	2405.0
6844.	c6e5oAoC+ho2=c6e5oyAoC+h2o2	3.00E+12	0.0	12000.0
6845.	c6e5oAoC+ch3=c6e5oyAoC+ch4	7.60E+00	3.4	3740.0
6846.	c6e5oAoC+o2=c6e5oyAoC+ho2	3.00E+13	0.0	39200.0
6847.	c6e5oyAoC=Ac5e4oB+co	1.83E+15	-0.7	12910.0
6848.	c6e5oyAoC+ho2=>Ac5e4oB+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
6849.	MeEc8oAoCrI+o2=MeEc8oAoCqjI	4.82E+36	-8.2	5167.0
6850.	MeEc8oAoCqjI=DMeEc8oAoCqI	5.75E+08	1.0	22600.0
6851.	MeEc8oAoCqjI=GMeEc8oAoCqI	9.89E+07	1.0	22000.0
6852.	DMeEc8oAoCqI+o2=MeEc8oAoCqIqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
6853.	MeEc8oAoCqIqjD=oh+MeEc8oAoCoIqD	5.75E+08	1.0	26000.0
6854.	MeEc8oAoCoIqD=oh+hcoch2co+MeBc5oAoF	1.00E+16	0.0	43000.0
6855.	GMeEc8oAoCqI+o2=MeEc8oAoCqIqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
6856.	MeEc8oAoCqIqjG=oh+MeEc8oAoCoIqG	9.89E+07	1.0	23000.0
6857.	MeEc8oAoCoIqG=oh+ch3hco+acrol+choch2ch2co	1.00E+16	0.0	43000.0
6858.	MeBc5oAoF+oh=>h2o+MeBc5oyAoF	4.20E+12	0.0	500.0
6859.	MeBc5oAoF+H=>H2+MeBc5oyAoF	4.00E+13	0.0	4200.0
6860.	MeBc5oAoF+ho2=>h2o2+MeBc5oyAoF	1.00E+12	0.0	10000.0
6861.	MeBc5oyAoF=>co+acrol+c2h5	2.00E+13	0.0	28700.0
6862.	MeBc5oyAoF+ho2=>oh+co2+acrol+c2h5	2.00E+13	0.0	0.0
6863.	EtDc7oBoIrA=ch2co+ac3h5hco+nc3h7	2.00E+13	0.0	30400.0
6864.	EtDc7oBoIrA=ch2co+c5h10+ch2hco	2.00E+13	0.0	30400.0
6865.	Fc9oAoD=pchoFojI	1.00E+08	0.9	5900.0
6866.	c5h10+choch2ch2co=Fc9oAoD	1.00E+11	0.0	9800.0
6867.	c2h5+c7e6oAoD=Fc9oAoD	1.50E+11	0.0	7200.0
6868.	c7e6oAoD+oh=c7e6oyAoD+h2o	2.30E+10	0.7	-1100.0
6869.	c7e6oAoD+H=c7e6oyAoD+H2	4.10E+09	1.2	2405.0
6870.	c7e6oAoD+ho2=c7e6oyAoD+h2o2	3.00E+12	0.0	12000.0
6871.	c7e6oAoD+ch3=c7e6oyAoD+ch4	7.60E+00	3.4	3740.0
6872.	c7e6oAoD+o2=c7e6oyAoD+ho2	3.00E+13	0.0	39200.0
6873.	c7e6oyAoD=Ac6e5oC+co	1.83E+15	-0.7	12910.0
6874.	c7e6oyAoD+ho2=>Ac6e5oC+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

6875.	BpchqDqF=oh+c3h6+chxoAqC	5.00E+13	0.0	25500.0
6876.	c2h4+AmchqBqD=ApchqDqF	1.32E+04	2.5	6130.0
6877.	ho2+mche1qD=AmchqBqD	8.00E+10	0.0	6000.0
6878.	oh+mche1ojD=mche1qD	1.81E+13	0.0	0.0
6879.	MeEc6e5oArG=mche1ojD	1.00E+08	0.9	5900.0
6880.	MeCc6e7oArF=mche1ojD	1.00E+08	0.9	5900.0
6881.	ac3h4+ch2ch2ch2hco=MeEc6e5oArG	1.76E+04	2.5	6130.0
6882.	c2h4+MeCc4e3oArE=MeCc6e7oArF	8.50E+10	0.0	11300.0
6883.	ch2hco+ac3h4=MeCc4e3oArE	1.76E+04	2.5	6130.0
6884.	ho2+pche6qD=GpchqDqF	8.00E+10	0.0	6000.0
6885.	oh+pche6ojD=pche6qD	1.81E+13	0.0	0.0
6886.	chxe3oA+nc3h7=pche6ojD	2.50E+10	0.0	10090.0
6887.	Ac9e2oF=pche6ojD	1.00E+08	0.9	5900.0
6888.	Ac9e3oF=pche6ojD	1.00E+08	0.9	5900.0
6889.	c4h6+Ac5oB=Ac9e2oF	2.64E+04	2.5	6130.0
6890.	c2h4+Ac7e1oD=Ac9e3oF	2.00E+11	0.0	2010.0
6891.	c2h2+Ac5oB=Ac7e1oD	7.77E+06	1.4	7755.0
6892.	oh+c9e1oFqD=HpchqDqF	4.76E+07	1.5	34700.0
6893.	oh+c9e1oFojD=c9e1oFqD	1.81E+13	0.0	0.0
6894.	ac3h5hco+Ac5oB=c9e1oFojD	3.33E+10	0.0	6397.0
6895.	ac3h5+c6oAoC=c9e1oFojD	5.00E+10	0.0	9600.0
6896.	mche1qDqF+c2h5=DpchqFqH	1.32E+04	2.5	6130.0
6897.	oh+MeEc8e9oAqC=DpchqFqH	4.76E+07	1.5	34700.0
6898.	oh+mche1qDojF=mche1qDqF	1.81E+13	0.0	0.0
6899.	MeEc6e5oAqCrG=mche1qDojF	1.00E+08	0.9	5900.0
6900.	MeCc6e7oAqErF=mche1qDojF	1.00E+08	0.9	5900.0
6901.	ac3h4+Dc4oAqC=MeEc6e5oAqCrG	1.76E+04	2.5	6130.0
6902.	ho2+ac3h5hco=Dc4oAqC	8.00E+10	0.0	6000.0
6903.	ho2+MeCc6e5e7oA=MeCc6e7oAqErF	8.00E+10	0.0	6000.0
6904.	MeCc6e5e7oA+oh=MeCc6e5e7oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
6905.	MeCc6e5e7oA+H=MeCc6e5e7oyA+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
6906.	MeCc6e5e7oA+ho2=MeCc6e5e7oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
6907.	MeCc6e5e7oyA=co+MeBc5e1e4rF	2.00E+13	0.0	28700.0
6908.	MeCc6e5e7oyA+ho2=oh+co2+MeBc5e1e4rF	2.00E+13	0.0	0.0
6909.	ac3h4+ac3h5=MeBc5e1e4rF	8.80E+03	2.5	6130.0
6910.	oh+MeEc8e9oAojC=MeEc8e9oAqC	1.81E+13	0.0	0.0
6911.	hcoch2hco+MeBc5e1rF=MeEc8e9oAojC	3.33E+10	0.0	6397.0
6912.	ch2hco+MeCc6e7oA=MeEc8e9oAojC	3.33E+10	0.0	6397.0
6913.	MeCc6e7oA+oh=MeCc6e7oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
6914.	MeCc6e7oA+H=MeCc6e7oyA+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
6915.	MeCc6e7oA+ho2=MeCc6e7oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
6916.	MeCc6e7oyA=co+MeBc5e1rF	2.00E+13	0.0	28700.0
6917.	MeCc6e7oyA+ho2=oh+co2+MeBc5e1rF	2.00E+13	0.0	0.0
6918.	Ic9e3qFqH=CpchqFqH	1.00E+08	0.9	5900.0
6919.	ho2+c9e1e6qD=Ic9e3qFqH	8.00E+10	0.0	6000.0
6920.	oh+c9e1e6ojD=c9e1e6qD	1.81E+13	0.0	0.0
6921.	ac3h5+c6e3oA=c9e1e6ojD	8.80E+03	2.5	6130.0
6922.	ac3h5hco+Cc5h9-1=c9e1e6ojD	8.80E+03	2.5	6130.0
6923.	c6e3oA+oh=c6e3oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
6924.	c6e3oA+H=c6e3oyA+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
6925.	c6e3oA+ho2=c6e3oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
6926.	c6e3oyA=co+Cc5h9-1	2.00E+13	0.0	28700.0
6927.	c6e3oyA+ho2=oh+co2+Cc5h9-1	2.00E+13	0.0	0.0
6928.	ho2+pche5qH=EpchqFqH	8.00E+10	0.0	6000.0
6929.	oh+pche5ojH=pche5qH	1.81E+13	0.0	0.0
6930.	EtDc7e1oIrC=pche5ojH	1.00E+08	0.9	5900.0
6931.	c7h12-13+ch2hco=EtDc7e1oIrC	1.32E+04	2.5	6130.0
6932.	chxoAoD+nc3h7=pchoGojD	8.50E+10	0.0	11900.0
6933.	Ac9oCoF=pchoGojD	1.00E+08	0.9	5900.0
6934.	c7oyAoD+c2h4=Ac9oCoF	2.11E+11	0.0	7350.0
6935.	c7oAoD+oh=>h2o+c7oyAoD	4.20E+12	0.0	500.0
6936.	c7oAoD+H=>H2+c7oyAoD	4.00E+13	0.0	4200.0
6937.	c7oAoD+ho2=>h2o2+c7oyAoD	1.00E+12	0.0	10000.0
6938.	c7oyAoD=>co+Ac6oC	2.00E+13	0.0	28700.0
6939.	c7oyAoD+ho2=>oh+co2+Ac6oC	2.00E+13	0.0	0.0
6940.	Fc9oAoC=pchoGojE	1.00E+08	0.9	5900.0
6941.	c5h10+ch2coch2hco=Fc9oAoC	1.50E+11	0.0	7200.0
6942.	Fc9oAoC+o2=c9oAoCqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
6943.	c9oAoCqjF=Dc9oAoCqF	5.75E+08	1.0	22500.0
6944.	Dc9oAoCqF+o2=c9oAoCqFqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
6945.	c9oAoCqFqjD=oh+c9oAoCoFqD	2.87E+08	1.0	23000.0
6946.	c9oAoCoFqD=oh+hcoch2co+c6oAoC	1.00E+16	0.0	43000.0
6947.	c6oAoC+oh=>h2o+c6oyAoC	4.20E+12	0.0	500.0
6948.	c6oAoC+H=>H2+c6oyAoC	4.00E+13	0.0	4200.0
6949.	c6oAoC+ho2=>h2o2+c6oyAoC	1.00E+12	0.0	10000.0
6950.	c6oyAoC=>co+Ac5oB	2.00E+13	0.0	28700.0
6951.	c6oyAoC+ho2=>oh+co2+Ac5oB	2.00E+13	0.0	0.0
6952.	c2h5+acrol=Bc5oA	1.50E+11	0.0	7200.0
6953.	EtDc7oyAoI=pchoGojF	1.00E+08	0.9	5900.0
6954.	Ipc9oAoB=pchoGojF	1.00E+08	0.9	5900.0
6955.	c5h10+c2h4cohco=Ipc9oAoB	1.50E+11	0.0	7200.0
6956.	c2h4+choco=c2h4cohco	2.11E+11	0.0	7350.0
6957.	nc3h7+c6e5oAoB=Ipc9oAoB	1.50E+11	0.0	7200.0
6958.	pche4e6+oh=h2o+Ipche4e6	2.25E+13	0.0	2217.0
6959.	pche4e6+oh=h2o+Dpche5e7	2.25E+13	0.0	2217.0
6960.	pche5e7+oh=h2o+Ipche5e7	2.25E+13	0.0	2217.0
6961.	pche5e7+oh=h2o+Dpche5e7	2.25E+13	0.0	2217.0
6962.	pche4e6+H=H2+Ipche4e6	5.00E+13	0.0	3900.0
6963.	pche4e6+H=H2+Dpche5e7	5.00E+13	0.0	3900.0
6964.	pche5e7+H=H2+Ipche5e7	5.00E+13	0.0	3900.0
6965.	pche5e7+H=H2+Dpche5e7	5.00E+13	0.0	3900.0
6966.	pche4e6+ho2=h2o2+Ipche4e6	3.20E+12	0.0	14900.0
6967.	pche4e6+ho2=h2o2+Dpche5e7	3.20E+12	0.0	14900.0
6968.	pche5e7+ho2=h2o2+Ipche5e7	3.20E+12	0.0	14900.0
6969.	pche5e7+ho2=h2o2+Dpche5e7	3.20E+12	0.0	14900.0
6970.	pche4e6+o2=ho2+Ipche4e6	4.00E+12	0.0	40000.0
6971.	pche4e6+o2=ho2+Dpche5e7	4.00E+12	0.0	40000.0
6972.	pche5e7+o2=ho2+Ipche5e7	4.00E+12	0.0	40000.0
6973.	pche5e7+o2=ho2+Dpche5e7	4.00E+12	0.0	40000.0
6974.	pche4e6+ch3=ch4+Ipche4e6	1.00E+11	0.0	7300.0
6975.	pche4e6+ch3=ch4+Dpche5e7	1.00E+11	0.0	7300.0
6976.	pche5e7+ch3=ch4+Ipche5e7	1.00E+11	0.0	7300.0
6977.	pche5e7+ch3=ch4+Dpche5e7	1.00E+11	0.0	7300.0
6978.	Ipche4e6=pbz+H	1.20E+13	0.0	22800.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

6979.	Dpche5e7=pbz+H	1.20E+13	0.0	20000.0
6980.	Ipche5e7=pbz+H	6.00E+12	0.0	20000.0
6981.	Ipche5e7=c6h6+nc3h7	2.00E+13	0.0	8800.0
6982.	Ipche4e6+H=pbz+H2	3.16E+13	0.0	0.0
6983.	Dpche5e7+H=pbz+H2	3.16E+13	0.0	0.0
6984.	Ipche5e7+H=pbz+H2	3.16E+13	0.0	0.0
6985.	Ipche4e6+o2=pbz+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
6986.	Dpche5e7+o2=pbz+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
6987.	Ipche5e7+o2=pbz+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
6988.	Ipche4e6+O=pbz+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
6989.	Dpche5e7+O=pbz+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
6990.	Ipche5e7+O=pbz+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
6991.	Ipche4e6+oh=pbz+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
6992.	Dpche5e7+oh=pbz+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
6993.	Ipche5e7+oh=pbz+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
6994.	Ipche4e6+ho2=pbz+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
6995.	Dpche5e7+ho2=pbz+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
6996.	Ipche5e7+ho2=pbz+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
6997.	Ipche4e6+ch3=pbz+ch4	8.00E+12	0.0	0.0
6998.	Dpche5e7+ch3=pbz+ch4	8.00E+12	0.0	0.0
6999.	Ipche5e7+ch3=pbz+ch4	8.00E+12	0.0	0.0
7000.	Ipche4e6+c2h5=pbz+c2h6	3.98E+12	0.0	0.0
7001.	Dpche5e7+c2h5=pbz+c2h6	3.98E+12	0.0	0.0
7002.	Ipche5e7+c2h5=pbz+c2h6	3.98E+12	0.0	0.0
7003.	Ipche4e6+nc3h7=pbz+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
7004.	Dpche5e7+nc3h7=pbz+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
7005.	Ipche5e7+nc3h7=pbz+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
7006.	Ipche4e6+ic3h7=pbz+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
7007.	Dpche5e7+ic3h7=pbz+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
7008.	Ipche5e7+ic3h7=pbz+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
7009.	Ipche4e6+c2h3=pbz+c2h4	3.98E+12	0.0	0.0
7010.	Dpche5e7+c2h3=pbz+c2h4	3.98E+12	0.0	0.0
7011.	Ipche5e7+c2h3=pbz+c2h4	3.98E+12	0.0	0.0
7012.	Ipche4e6+ac3h5=pbz+c3h6	3.98E+12	0.0	0.0
7013.	Dpche5e7+ac3h5=pbz+c3h6	3.98E+12	0.0	0.0
7014.	Ipche5e7+ac3h5=pbz+c3h6	3.98E+12	0.0	0.0
7015.	Ipche4e6+pchA=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7016.	Dpche5e7+pchA=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7017.	Ipche5e7+pchA=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7018.	Ipche4e6+pchB=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7019.	Dpche5e7+pchB=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7020.	Ipche5e7+pchB=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7021.	Ipche4e6+pchC=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7022.	Dpche5e7+pchC=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7023.	Ipche5e7+pchC=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7024.	Ipche4e6+pchD=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7025.	Dpche5e7+pchD=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7026.	Ipche5e7+pchD=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7027.	Ipche4e6+pchE=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7028.	Dpche5e7+pchE=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7029.	Ipche5e7+pchE=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7030.	Ipche4e6+pchF=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7031.	Dpche5e7+pchF=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7032.	Ipche5e7+pchF=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7033.	Ipche4e6+pchG=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7034.	Dpche5e7+pchG=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7035.	Ipche5e7+pchG=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
7036.	Ipche4e6+ch3o2=pbz+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7037.	Dpche5e7+ch3o2=pbz+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7038.	Ipche5e7+ch3o2=pbz+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7039.	Ipche4e6+c2h5o2=pbz+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7040.	Dpche5e7+c2h5o2=pbz+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7041.	Ipche5e7+c2h5o2=pbz+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7042.	Ipche4e6+nc3h7o2=pbz+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7043.	Dpche5e7+nc3h7o2=pbz+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7044.	Ipche5e7+nc3h7o2=pbz+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7045.	Ipche4e6+hco3=pbz+hco3h	2.66E+11	0.0	11269.0
7046.	Dpche5e7+hco3=pbz+hco3h	2.66E+11	0.0	11269.0
7047.	Ipche5e7+hco3=pbz+hco3h	2.66E+11	0.0	11269.0
7048.	Ipche4e6+pchqjA=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7049.	Dpche5e7+pchqjA=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7050.	Ipche5e7+pchqjA=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7051.	Ipche4e6+pchqjB=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7052.	Dpche5e7+pchqjB=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7053.	Ipche5e7+pchqjB=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7054.	Ipche4e6+pchqjC=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7055.	Dpche5e7+pchqjC=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7056.	Ipche5e7+pchqjC=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7057.	Ipche4e6+pchqjD=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7058.	Dpche5e7+pchqjD=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7059.	Ipche5e7+pchqjD=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7060.	Ipche4e6+pchqjE=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7061.	Dpche5e7+pchqjE=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7062.	Ipche5e7+pchqjE=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7063.	Ipche4e6+pchqjF=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7064.	Dpche5e7+pchqjF=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7065.	Ipche5e7+pchqjF=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7066.	Ipche4e6+pchqjG=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7067.	Dpche5e7+pchqjG=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7068.	Ipche5e7+pchqjG=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
7069.	ac3h5+ch3co=c5e4oB	1.00E+13	0.0	0.0
7070.	c5e4oB+o2=Cc5e4oB+ho2	7.00E+10	0.0	36015.0
7071.	c5e4oB+oh=Cc5e4oB+h2o	7.70E+05	2.2	622.0
7072.	c5e4oB+H=Cc5e4oB+H2	7.00E+06	2.0	0.0
7073.	c5e4oB+ho2=Cc5e4oB+h2o2	2.00E+11	0.0	12600.0
7074.	c5e4oB+ch3=Cc5e4oB+ch4	2.00E+14	0.0	22800.0
7075.	Cc5e4oB+O=ch3cocho+c2h3	2.00E+14	0.0	0.0
7076.	Cc5e4oB+O=ch3co+acrol	2.00E+14	0.0	0.0
7077.	Cc5e4oB+ho2=ch3cocho+c2h3+oh	1.00E+13	0.0	0.0
7078.	Cc5e4oB+ho2=ch3co+acrol+oh	1.00E+13	0.0	0.0
7079.	c5e4oB+o2=Ac5e4oB+ho2	3.01E+13	0.0	48500.0
7080.	c5e4oB+oh=Ac5e4oB+h2o	3.38E+07	1.7	830.0
7081.	c5e4oB+H=Ac5e4oB+H2	1.15E+05	2.7	6260.0
7082.	c5e4oB+ho2=Ac5e4oB+h2o2	8.50E+12	0.0	20460.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

7083.	c5e4oB+ch3=Ac5e4oB+ch4	1.98E+11	0.0	9784.0
7084.	c7e6oyA+ho2=>co2+oh+Fc6h11-1	2.00E+13	0.0	0.0
7085.	Fc9oAoG+o2=c9oAoGqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
7086.	c9oAoGqjF=Hc9oAoGqF	5.75E+08	1.0	22600.0
7087.	Hc9oAoGqF+o2=c9oAoGqFqjH	1.84E+45	-11.1	6538.0
7088.	c9oAoGqFqjH=oh+c9oAoGoFqH	2.87E+08	1.0	20600.0
7089.	c9oAoGoFqH=>oh+ch3hco+c7oyAoBoG	1.00E+16	0.0	43000.0
7090.	c7oyAoBoG=>co+c6oyAoF	2.00E+13	0.0	28700.0
7091.	c7oyAoBoG+ho2=>co2+oh+c6oyAoF	2.00E+13	0.0	0.0
7092.	c6oyAoF=>co+Ec5oA	2.00E+13	0.0	28700.0
7093.	c6oyAoF+ho2=>co2+oh+Ec5oA	2.00E+13	0.0	0.0
7094.	c2h4+ch2ch2hco=Ec5oA	3.30E+11	0.0	7200.0
7095.	Ec5oA+o2=c5oAqjE	4.82E+36	-8.2	5167.0
7096.	c5oAqjE=Cc5oAqE	5.75E+08	1.0	25000.0
7097.	c5oAqjE=Bc5oAqE	9.89E+07	1.0	20000.0
7098.	Cc5oAqE=>oh+ch2o+ac3h5hco	2.00E+13	0.0	28700.0
7099.	Cc5oAqE+o2=c5oAqEqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
7100.	Bc5oAqE+o2=c5oAqEqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
7101.	c5oAqEqjC=oh+c5oAoEqC	2.87E+08	1.0	23000.0
7102.	c5oAqEqjB=oh+c5oAoEqB	4.94E+07	1.0	18000.0
7103.	c5oAoEqC=>oh+hcoch2hco+ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
7104.	c5oAoEqB=>oh+hco+choch2ch2cho	1.00E+16	0.0	43000.0
7105.	ch2co+cyc6h11=AechoB	2.11E+11	0.0	7350.0
7106.	Bc5oAoC+O=c2h5co+chocho	2.00E+14	0.0	0.0
7107.	Bc5oAoC+ho2=oh+c2h5co+chocho	1.00E+13	0.0	0.0
7108.	Bc5oAoC+o2=c2h5+co2+chocho	1.23E+36	-7.2	33600.0
7109.	c6oAoCoF+oh=>h2o+c6oyAoCoF	4.20E+12	0.0	500.0
7110.	c6oAoCoF+H=>H2+c6oyAoCoF	4.00E+13	0.0	4200.0
7111.	c6oAoCoF+ho2=>h2o2+c6oyAoCoF	1.00E+12	0.0	10000.0
7112.	c6oyAoCoF=>co+Ec5oAoD	2.00E+13	0.0	28700.0
7113.	c6oyAoCoF+ho2=>oh+co2+Ec5oAoD	2.00E+13	0.0	0.0
7114.	c6oAoCoF+oh=>h2o+c6oAoCoyF	4.20E+12	0.0	500.0
7115.	c6oAoCoF+H=>H2+c6oAoCoyF	4.00E+13	0.0	4200.0
7116.	c6oAoCoF+ho2=>h2o2+c6oAoCoyF	1.00E+12	0.0	10000.0
7117.	c6oAoCoyF=>co+Ec5oAoC	2.00E+13	0.0	28700.0
7118.	c6oAoCoyF+ho2=>oh+co2+Ec5oAoC	2.00E+13	0.0	0.0
7119.	c2h4+hcoch2co=Ec5oAoC	2.11E+11	0.0	7350.0
7120.	Cc6oAoD=etvinket+hco	2.00E+13	0.0	33800.0
7121.	MeCc6oAoDoG+oh=>h2o+MeCc6oyAoDoG	4.20E+12	0.0	500.0
7122.	MeCc6oAoDoG+H=>H2+MeCc6oyAoDoG	4.00E+13	0.0	4200.0
7123.	MeCc6oAoDoG+ho2=>h2o2+MeCc6oyAoDoG	1.00E+12	0.0	10000.0
7124.	MeCc6oyAoDoG=>co+MeBc5oAoCrF	2.00E+13	0.0	28700.0
7125.	MeCc6oyAoDoG+ho2=>oh+co2+MeBc5oAoCrF	2.00E+13	0.0	0.0
7126.	MeCc6oAoDoG+oh=>h2o+MeCc6oAoDoyG	4.20E+12	0.0	500.0
7127.	MeCc6oAoDoG+H=>H2+MeCc6oAoDoyG	4.00E+13	0.0	4200.0
7128.	MeCc6oAoDoG+ho2=>h2o2+MeCc6oAoDoyG	1.00E+12	0.0	10000.0
7129.	MeCc6oAoDoyG=>co+Cc6oAoD	2.00E+13	0.0	28700.0
7130.	MeCc6oAoDoyG+ho2=>oh+co2+Cc6oAoD	2.00E+13	0.0	0.0
7131.	acrol+c2h5co=MeBc5oAoCrF	2.11E+11	0.0	7350.0
7132.	hco+etvinket=MeBc5oAoCrF	2.11E+11	0.0	7350.0
7133.	c7e6oAoC+oh=c7e6oyAoC+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
7134.	c7e6oAoC+H=c7e6oyAoC+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
7135.	c7e6oAoC+ho2=c7e6oyAoC+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
7136.	c7e6oyAoC=Ac6e5oB+co	2.00E+13	0.0	28700.0
7137.	c7e6oyAoC+ho2=>Ac6e5oB+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
7138.	Ac9oDoF+o2=c9oDoFqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
7139.	c9oDoFqjA=Cc9oDoFqA	5.75E+08	1.0	22600.0
7140.	Cc9oDoFqA+o2=c9oDoFqAqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
7141.	c9oDoFqAqjC=oh+c9oAoDoFqC	5.75E+08	1.0	26000.0
7142.	c9oAoDoFqC=oh+hcoch2hco+c6oyAoC	1.00E+16	0.0	43000.0
7143.	ho2+pche5qD=FpchqDqE	8.00E+10	0.0	6000.0
7144.	pche5qD=pche5ojD+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
7145.	oh+c9e1qAoF=FpchqDqE	4.76E+07	1.5	34700.0
7146.	c9e1qAoF=c9e1ojAoF+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
7147.	Ac6oC+acrol=c9e1ojAoF	1.32E+04	2.5	6130.0
7148.	c5e4oB+oh=Dc5oBohE	9.93E+11	0.0	-960.0
7149.	Dc5oBohE+o2=c5oBqjDohE	1.20E+11	0.0	-1100.0
7150.	c5oBqjDohE=c4oAoC+ch2o+oh	1.25E+10	0.0	18900.0
7151.	c4oAoC+oh=c4oyAoC+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
7152.	c4oAoC+H=c4oyAoC+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
7153.	c4oAoC+ho2=c4oyAoC+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
7154.	c4oyAoC=ch2coch3+co	2.00E+13	0.0	28700.0
7155.	c4oyAoC+ho2=>ch2coch3+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
7156.	ch2co+mchA=ApchoB	1.76E+04	2.5	6130.0
7157.	acrol+cyc6h11=BpchoA	1.32E+04	2.5	6130.0
7158.	c2h4+chxco=ApchoC	1.00E+11	0.0	7800.0
7159.	hco+eche1=CpchoA	1.00E+11	0.0	7800.0
7160.	c4h6+hco=Cc5e4oA	1.00E+11	0.0	7800.0
7161.	mche1+ch2hco=DpchoA	1.32E+04	2.5	6130.0
7162.	c2h4+AmchoC=ApchoE	1.32E+04	2.5	6130.0
7163.	cyc6h10+ch2ch2hco=EpchoA	1.32E+04	2.5	6130.0
7164.	c2h4+AmchoD=ApchoF	1.32E+04	2.5	6130.0
7165.	EtDc7e6oArI=FpchoA	1.00E+08	0.9	5900.0
7166.	ch2hco+c7h12-16=Dc9e8oA	1.32E+04	2.5	6130.0
7167.	c4h7hco-1+Dc4h7-1=Dc9e8oA	1.32E+04	2.5	6130.0
7168.	c2h4+Dc7e6oA=EtDc7e6oArI	1.32E+04	2.5	6130.0
7169.	c5h8-14+ch2hco=Dc7e6oA	1.32E+04	2.5	6130.0
7170.	ch3chco+cyc6h11=BpchoC	1.76E+04	2.5	6130.0
7171.	Ic9e3oB=CpchoB	1.00E+08	0.9	5900.0
7172.	c2h4+Gc7e3oB=Ic9e3oB	1.32E+04	2.5	6130.0
7173.	c2h4+Cc5e4oB=Gc7e3oB	8.80E+03	2.5	6130.0
7174.	ch3co+mche1=DpchoB	1.00E+11	0.0	7800.0
7175.	c3h6+Bchxone=BpchoE	8.80E+03	2.5	6130.0
7176.	ch2coch3+cyc6h10=EpchoB	8.80E+03	2.5	6130.0
7177.	c2h4+Ec5e4oB=Gc7e4oB	2.00E+11	0.0	2010.0
7178.	c3h6+Cchxone=BpchoF	2.64E+04	2.5	6130.0
7179.	Dc9e8oB=FpchoB	1.00E+08	0.9	5900.0
7180.	EtDc7e6oBrI=FpchoB	1.00E+08	0.9	5900.0
7181.	ch3co+c7h12-16=Dc9e8oB	2.00E+11	0.0	7800.0
7182.	c5e4oB+Dc4h7-1=Dc9e8oB	1.32E+04	2.5	6130.0
7183.	c2h4+Dc7e6oB=EtDc7e6oBrI	1.32E+04	2.5	6130.0
7184.	c5h8-14+ch3co=Dc7e6oB	1.00E+11	0.0	7800.0
7185.	c5e4oB+c2h3=Dc7e6oB	2.00E+11	0.0	2010.0
7186.	c3h6+Dchxone=BpchoG	2.64E+04	2.5	6130.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

7187.	MeDc8e7oBrI=GpchoB	1.00E+08	0.9	5900.0
7188.	c5e4oB+Dc4h7-1=MeDc8e7oBrI	1.32E+04	2.5	6130.0
7189.	ch2coch3+c6h10-15=MeDc8e7oBrI	1.32E+04	2.5	6130.0
7190.	MeDc8e9oCrH=DpchoC	1.00E+08	0.9	5900.0
7191.	c2h4+MeCc6e7oDrA=MeDc8e9oCrH	1.32E+04	2.5	6130.0
7192.	c2h4+Bc5e1oC=MeCc6e7oDrA	2.00E+11	0.0	2010.0
7193.	c2h5+ch2cco=Bc5e1oC	1.76E+04	2.5	6130.0
7194.	c9e6oyA=CpchoE	1.00E+08	0.9	5900.0
7195.	c9e6oyA=co+Hc8h15-3	2.00E+13	0.0	28700.0
7196.	c2h4+Ac6h11-3=Hc8h15-3	1.32E+04	2.5	6130.0
7197.	cyc6h10+c2h5co=EpchoC	1.00E+11	0.0	7800.0
7198.	ch3+eche1oE=CpchoF	1.32E+04	2.5	6130.0
7199.	Ac9e6oD=CpchoF	1.00E+08	0.9	5900.0
7200.	c2h4+Ac7e4oB=Ac9e6oD	8.80E+03	2.5	6130.0
7201.	ch2co+Cc5h9-1=Ac7e4oB	8.80E+03	2.5	6130.0
7202.	EtDc7e6oCrI=FpchoC	1.00E+08	0.9	5900.0
7203.	Dc9e8oC=FpchoC	1.00E+08	0.9	5900.0
7204.	Dc7e1oE+c2h4=EtDc7e6oCrI	1.32E+04	2.5	6130.0
7205.	etvinket+c2h3=Dc7e1oE	4.00E+11	0.0	2010.0
7206.	etvinket+Dc4h7-1=Dc9e8oC	1.32E+04	2.5	6130.0
7207.	ch3+eche1oF=CpchoG	1.32E+04	2.5	6130.0
7208.	MeDc8e7oCrI=GpchoC	1.00E+08	0.9	5900.0
7209.	etvinket+Dc4h7-1=MeDc8e7oCrI	1.32E+04	2.5	6130.0
7210.	c6h10-15+c2h5co=MeDc8e7oCrI	1.00E+11	0.0	7800.0
7211.	mche1oC+c2h5=DpchoE	1.32E+04	2.5	6130.0
7212.	MeEc8e9oyA=DpchoF	1.00E+08	0.9	5900.0
7213.	ac3h4+nc3h7=MeBc5e1rF	2.00E+11	0.0	11300.0
7214.	MeBc5e1rF+o2=ch2o+Ac5oB	3.08E+09	0.4	16910.0
7215.	MeEc8e9oyA=co+MeDc7e8rA	2.00E+13	0.0	28700.0
7216.	MeEc8e9oyA+ho2=co2+oh+MeDc7e8rA	2.00E+13	0.0	0.0
7217.	c2h4+MeBc5e1rF=MeDc7e8rA	8.80E+03	2.5	6130.0
7218.	mche1oE+c2h5=DpchoG	1.32E+04	2.5	6130.0
7219.	chxe2oA+nc3h7=EpchoF	1.32E+04	2.5	6130.0
7220.	EtDc7e1oCrI=FpchoE	1.00E+08	0.9	5900.0
7221.	c2h4+Dc7e1oC=EtDc7e1oCrI	1.32E+04	2.5	6130.0
7222.	divinket+c2h5=Dc7e1oC	2.64E+04	2.5	6130.0
7223.	chxe3oA+nc3h7=EpchoG	1.32E+04	2.5	6130.0
7224.	MeEc8e1oyI=GpchoE	1.00E+08	0.9	5900.0
7225.	MeEc8e1oyI=co+Ec8h15-1	2.00E+13	0.0	28700.0
7226.	ac3h5+c5h10=Ec8h15-1	8.80E+03	2.5	6130.0
7227.	c2h5+c6h10-15=Ec8h15-1	1.32E+04	2.5	6130.0
7228.	chxe3oA+nc3h7=EpchoH	1.32E+04	2.5	6130.0
7229.	EtDc7e1oHrI=HpchoE	1.00E+08	0.9	5900.0
7230.	Fc9e1oE=HpchoE	1.00E+08	0.9	5900.0
7231.	c7e1e6oC+c2h5=Fc9e1oE	1.32E+04	2.5	6130.0
7232.	c3h7chco+Dc4h7-1=Fc9e1oE	1.76E+04	2.5	6130.0
7233.	ch2co+Dc7h13-1=EtDc7e1oHrI	1.76E+04	2.5	6130.0
7234.	c2h5+c5h8-14=Dc7h13-1	5.28E+04	2.5	6130.0
7235.	chxe2oA+nc3h7=IpchoE	1.32E+04	2.5	6130.0
7236.	Fc9e1oC=FpchoG	1.00E+08	0.9	5900.0
7237.	ch2coc2h3+c5h10=Fc9e1oC	8.80E+03	2.5	6130.0
7238.	c7e1e6oC+c2h5=Fc9e1oC	1.32E+04	2.5	6130.0
7239.	MeEc8e1oCrI=GpchoF	1.00E+08	0.9	5900.0
7240.	ch2coc2h3+c5h10=MeEc8e1oCrI	8.80E+03	2.5	6130.0
7241.	c6e1e5oC+nc3h7=MeEc8e1oCrI	1.32E+04	2.5	6130.0
7242.	EtDc7e1oyI=HpchoF	1.00E+08	0.9	5900.0
7243.	EtDc7e1oyI=co+MeDc7e1rH	2.00E+13	0.0	28700.0
7244.	nc3h7+c5h8-14=MeDc7e1rH	2.64E+04	2.5	6130.0
7245.	ac3h5+c5h10=MeDc7e1rH	8.80E+03	2.5	6130.0
7246.	ho2+pche3qF=CpchqDqF	8.00E+10	0.0	6000.0
7247.	Etall+ch2ch2ch2hco=MeEc8e5oArI	1.76E+04	2.5	6130.0
7248.	ch3co+Etall=MeCc6e3oArG	1.76E+04	2.5	6130.0
7249.	Etall+ho2=oh+ch2o+c4h6	5.00E+11	0.0	19000.0
7250.	Etall+ho2=oh+ch2co+c3h6	5.00E+11	0.0	19000.0
7251.	Etall+ho2=oh+ethco+c2h2	5.00E+11	0.0	19000.0
7252.	ho2+pche4qB=EpchqDqB	8.00E+10	0.0	6000.0
7253.	c6e2e5oA+oh=c6e2e5oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
7254.	c6e2e5oA+H=c6e2e5oyA+H2	4.00E+13	0.0	4200.0
7255.	c6e2e5oA+ho2=c6e2e5oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
7256.	c6e2e5oyA=c2h2+ac3h5+co	2.00E+13	0.0	28700.0
7257.	c6e2e5oyA+ho2=>c2h2+ac3h5+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
7258.	mche1oE+oh=ch2o+Dchxone	1.40E+12	0.0	-900.0
7259.	mche1oE+oh=ch3+chxoAoD	1.40E+12	0.0	-900.0
7260.	eche1e3+oh=ch2o+Cmche1	1.40E+12	0.0	-900.0
7261.	eche1e3+oh=ch3+mche2oA	1.40E+12	0.0	-900.0
7262.	eche1e3+oh=2c2h4+ch2coc2h3	1.40E+12	0.0	-900.0
7263.	eche1e3+oh=c4h6+ch2ch2ch2hco	1.40E+12	0.0	-900.0
7264.	phc4h9=pc4h9+c6h5	5.00E+16	0.0	86500.0
7265.	phc4h9=phch2+nc3h7	4.00E+15	0.0	76260.0
7266.	phc4h9=Aphc2h4+c2h5	5.00E+16	0.0	78500.0
7267.	phc4h9=pbzjA+ch3	5.00E+16	0.0	86755.0
7268.	phc4h9=Aphc4h8+H	9.00E+15	0.0	101120.0
7269.	phc4h9=Bphc4h8+H	6.00E+15	0.0	98460.0
7270.	phc4h9=Cphc4h8+H	6.00E+15	0.0	98460.0
7271.	phc4h9=Dphc4h8+H	6.00E+15	0.0	86515.0
7272.	phc4h9+o2=Dphc4h8+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
7273.	phc4h9+o2=Cphc4h8+ho2	4.00E+13	0.0	47600.0
7274.	phc4h9+o2=Bphc4h8+ho2	4.00E+13	0.0	47600.0
7275.	phc4h9+o2=Aphc4h8+ho2	2.50E+13	0.0	49000.0
7276.	phc4h9+H=c6h6+pc4h9	4.80E+13	0.0	5123.0
7277.	phc4h9+oh=c6h5oh+pc4h9	7.83E+02	2.9	3221.0
7278.	phc4h9+oh=Dphc4h8+h2o	2.65E+12	0.0	0.0
7279.	phc4h9+oh=Bphc4h8+h2o	7.08E+06	1.9	-159.0
7280.	phc4h9+oh=Cphc4h8+h2o	7.08E+06	1.9	-159.0
7281.	phc4h9+oh=Aphc4h8+h2o	3.16E+07	1.8	934.0
7282.	phc4h9+ho2=Aphc4h8+h2o2	1.80E+04	2.5	16790.0
7283.	phc4h9+ho2=Bphc4h8+h2o2	4.90E+04	2.5	14860.0
7284.	phc4h9+ho2=Cphc4h8+h2o2	4.90E+04	2.5	14860.0
7285.	phc4h9+ho2=Dphc4h8+h2o2	6.80E+03	2.5	10115.0
7286.	phc4h9+H=Aphc4h8+H2	1.33E+06	2.5	6756.0
7287.	phc4h9+H=Bphc4h8+H2	1.30E+06	2.4	4470.0
7288.	phc4h9+H=Cphc4h8+H2	1.30E+06	2.4	4470.0
7289.	phc4h9+H=Dphc4h8+H2	1.01E+04	2.9	1931.0
7290.	phc4h9+O=Dphc4h8+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

7291.	phc4h9+O=Cphc4h8+oh	5.62E+13	0.0	5200.0
7292.	phc4h9+O=Bphc4h8+oh	5.62E+13	0.0	5200.0
7293.	phc4h9+O=Aphc4h8+oh	1.13E+14	0.0	7850.0
7294.	phc4h9+ch3=Aphc4h8+ch4	2.75E-01	3.6	7150.0
7295.	phc4h9+ch3=Bphc4h8+ch4	1.50E+00	3.5	5480.0
7296.	phc4h9+ch3=Cphc4h8+ch4	1.50E+00	3.5	5480.0
7297.	phc4h9+ch3=Dphc4h8+ch4	1.50E+00	3.5	4480.0
7298.	phc4h9+c2h5=Dphc4h8+c2h6	6.72E+10	0.0	7214.0
7299.	phc4h9+c2h5=Cphc4h8+c2h6	1.00E+11	0.0	10400.0
7300.	phc4h9+c2h5=Bphc4h8+c2h6	1.00E+11	0.0	10400.0
7301.	phc4h9+c2h5=Aphc4h8+c2h6	1.58E+11	0.0	12300.0
7302.	phc4h9+c2h3=Dphc4h8+c2h4	2.60E+12	0.0	6012.0
7303.	phc4h9+c2h3=Cphc4h8+c2h4	8.00E+11	0.0	16800.0
7304.	phc4h9+c2h3=Bphc4h8+c2h4	8.00E+11	0.0	16800.0
7305.	phc4h9+c2h3=Aphc4h8+c2h4	1.00E+12	0.0	18000.0
7306.	phc4h9+nc3h7=Dphc4h8+c3h8	6.72E+10	0.0	7214.0
7307.	phc4h9+nc3h7=Cphc4h8+c3h8	1.00E+11	0.0	10400.0
7308.	phc4h9+nc3h7=Bphc4h8+c3h8	1.00E+11	0.0	10400.0
7309.	phc4h9+nc3h7=Aphc4h8+c3h8	1.58E+11	0.0	12300.0
7310.	phc4h9+ic3h7=Dphc4h8+c3h8	6.72E+10	0.0	8214.0
7311.	phc4h9+ic3h7=Cphc4h8+c3h8	1.00E+11	0.0	11400.0
7312.	phc4h9+ic3h7=Bphc4h8+c3h8	1.00E+11	0.0	11400.0
7313.	phc4h9+ic3h7=Aphc4h8+c3h8	1.58E+11	0.0	13300.0
7314.	phc4h9+ac3h5=Dphc4h8+c3h6	2.80E+12	0.0	11219.0
7315.	phc4h9+ac3h5=Cphc4h8+c3h6	3.16E+11	0.0	16400.0
7316.	phc4h9+ac3h5=Bphc4h8+c3h6	3.16E+11	0.0	16400.0
7317.	phc4h9+ac3h5=Aphc4h8+c3h6	7.94E+11	0.0	20500.0
7318.	phc4h9+ch3o=Cphc4h8+ch3oh	6.00E+11	0.0	7000.0
7319.	phc4h9+ch3o=Bphc4h8+ch3oh	6.00E+11	0.0	7000.0
7320.	phc4h9+ch3o=Aphc4h8+ch3oh	3.00E+11	0.0	7000.0
7321.	phc4h9+c2h5o=Cphc4h8+c2h5oh	6.00E+11	0.0	7000.0
7322.	phc4h9+c2h5o=Bphc4h8+c2h5oh	6.00E+11	0.0	7000.0
7323.	phc4h9+c2h5o=Aphc4h8+c2h5oh	3.00E+11	0.0	7000.0
7324.	phc4h9+ch3o2=Dphc4h8+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7325.	phc4h9+ch3o2=Cphc4h8+ch3o2h	1.12E+13	0.0	17700.0
7326.	phc4h9+ch3o2=Bphc4h8+ch3o2h	1.12E+13	0.0	17700.0
7327.	phc4h9+ch3o2=Aphc4h8+ch3o2h	1.70E+13	0.0	20460.0
7328.	phc4h9+c2h5o2=Dphc4h8+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7329.	phc4h9+c2h5o2=Cphc4h8+c2h5o2h	1.12E+13	0.0	17700.0
7330.	phc4h9+c2h5o2=Bphc4h8+c2h5o2h	1.12E+13	0.0	17700.0
7331.	phc4h9+c2h5o2=Aphc4h8+c2h5o2h	1.70E+13	0.0	20460.0
7332.	phc4h9+nc3h7o2=Dphc4h8+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7333.	phc4h9+nc3h7o2=Cphc4h8+nc3h7o2h	1.12E+13	0.0	17700.0
7334.	phc4h9+nc3h7o2=Bphc4h8+nc3h7o2h	1.12E+13	0.0	17700.0
7335.	phc4h9+nc3h7o2=Aphc4h8+nc3h7o2h	1.70E+13	0.0	20460.0
7336.	phc4h9+ic3h7o2=Dphc4h8+ic3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7337.	phc4h9+ic3h7o2=Cphc4h8+ic3h7o2h	1.12E+13	0.0	17700.0
7338.	phc4h9+ic3h7o2=Bphc4h8+ic3h7o2h	1.12E+13	0.0	17700.0
7339.	phc4h9+ic3h7o2=Aphc4h8+ic3h7o2h	1.70E+13	0.0	20460.0
7340.	phc4h9+hco3=Cphc4h8+hco3h	4.00E+12	0.0	17000.0
7341.	phc4h9+hco3=Bphc4h8+hco3h	4.00E+12	0.0	17000.0
7342.	phc4h9+hco3=Aphc4h8+hco3h	1.70E+13	0.0	20430.0
7343.	Dphc4h8=styren+c2h5	2.00E+13	0.0	31800.0
7344.	c3h6+phch2=Bphc4h8	8.50E+10	0.0	11300.0
7345.	Cphc4h8=ch3+phc3h5-1	2.00E+13	0.0	24000.0
7346.	Cphc4h8=c6h5+c4h8	2.00E+13	0.0	35900.0
7347.	Aphc2h4+c2h4=Aphc4h8	2.41E+49	-11.2	28800.0
7348.	Dphsecb=styren+c2h5	2.00E+13	0.0	18600.0
7349.	Dphc4h8=phc4h7-3+H	1.20E+13	0.0	47900.0
7350.	Cphc4h8=phc4h7-3+H	1.20E+13	0.0	36000.0
7351.	Cphc4h8=phc4h7-2+H	1.20E+13	0.0	33400.0
7352.	Bphc4h8=phc4h7-2+H	1.20E+13	0.0	33400.0
7353.	Bphc4h8=phc4h7-1+H	1.80E+13	0.0	31300.0
7354.	Aphc4h8=phc4h7-1+H	1.20E+13	0.0	28600.0
7355.	Dphc4h8+o2=phc4h7-3+ho2	1.58E+12	0.0	15200.0
7356.	Cphc4h8+o2=phc4h7-3+ho2	1.00E+12	0.0	5000.0
7357.	Cphc4h8+o2=phc4h7-2+ho2	1.00E+15	0.0	11000.0
7358.	Bphc4h8+o2=phc4h7-2+ho2	1.00E+15	0.0	11000.0
7359.	Bphc4h8+o2=phc4h7-1+ho2	1.00E+15	0.0	11000.0
7360.	Aphc4h8+o2=phc4h7-1+ho2	1.00E+15	0.0	11000.0
7361.	Dphc4h8+O=phhco+nc3h7	1.60E+13	0.0	0.0
7362.	Cphc4h8+O=phch2+ethco	2.00E+13	0.0	4000.0
7363.	Bphc4h8+O=Aphc2h4+ch3hco	2.00E+13	0.0	4000.0
7364.	Aphc4h8+O=ch2o+pbzjA	2.00E+13	0.0	4000.0
7365.	Dphc4h8+oh=phhco+c3h8	1.60E+13	0.0	0.0
7366.	Cphc4h8+oh=toluen+ethco	2.00E+13	0.0	4000.0
7367.	Bphc4h8+oh=phc2h5+ch3hco	2.00E+13	0.0	4000.0
7368.	Aphc4h8+oh=pbz+ch2o	2.00E+13	0.0	4000.0
7369.	Dphc4h8+ho2=>phhco+nc3h7+oh	1.60E+13	0.0	0.0
7370.	Cphc4h8+ho2=>phch2+ethco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7371.	Bphc4h8+ho2=>Aphc2h4+ch3hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7372.	Aphc4h8+ho2=>ch2o+pbzjA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7373.	Cphc4h8=Dphsecb	2.00E+11	0.0	20000.0
7374.	Aphc4h8=Dphc4h8	6.00E+11	0.0	14000.0
0	Reverse Arrhenius coefficients:	3.00E+12	0.0	34000.0
7375.	Aphc4h8=Cphc4h8	4.50E+12	0.0	35000.0
7376.	Cphc4h8=Bphc4h8	1.20E+13	0.0	36000.0
0	Reverse Arrhenius coefficients:	1.20E+13	0.0	36000.0
7377.	Cphc4h8=Dphc4h8	1.20E+13	0.0	35000.0
7378.	Cphc4h8+o2=phc4h8qjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
7379.	Bphc4h8+o2=phc4h8qjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
7380.	Aphc4h8+o2=phc4h8qjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
7381.	Dphc4h8+o2=phc4h8qjD	2.43E+39	-9.0	8620.0
7382.	Dphc4h8+ho2=phc4h8ojD+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
7383.	Cphc4h8+ho2=phc4h8ojC+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
7384.	Bphc4h8+ho2=phc4h8ojB+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
7385.	Aphc4h8+ho2=phc4h8ojA+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
7386.	Dphc4h8+ch3o2=phc4h8ojD+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7387.	Cphc4h8+ch3o2=phc4h8ojC+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7388.	Bphc4h8+ch3o2=phc4h8ojB+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7389.	Aphc4h8+ch3o2=phc4h8ojA+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7390.	Dphc4h8+c2h5o2=phc4h8ojD+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7391.	Cphc4h8+c2h5o2=phc4h8ojC+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7392.	Bphc4h8+c2h5o2=phc4h8ojB+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

7393.	Aphc4h8+c2h5o2=phc4h8ojA+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7394.	Dphc4h8+nc3h7o2=phc4h8ojD+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7395.	Cphc4h8+nc3h7o2=phc4h8ojC+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7396.	Bphc4h8+nc3h7o2=phc4h8ojB+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7397.	Aphc4h8+nc3h7o2=phc4h8ojA+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7398.	Dphc4h8+ic3h7o2=phc4h8ojD+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7399.	Cphc4h8+ic3h7o2=phc4h8ojC+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7400.	Bphc4h8+ic3h7o2=phc4h8ojB+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7401.	Aphc4h8+ic3h7o2=phc4h8ojA+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7402.	Dphc4h8+phc4h8qjD=phc4h8ojD+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
7403.	Cphc4h8+phc4h8qjD=phc4h8ojC+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
7404.	Bphc4h8+phc4h8qjD=phc4h8ojB+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
7405.	Aphc4h8+phc4h8qjD=phc4h8ojA+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
7406.	Dphc4h8+phc4h8qjC=phc4h8ojD+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
7407.	Cphc4h8+phc4h8qjC=phc4h8ojC+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
7408.	Bphc4h8+phc4h8qjC=phc4h8ojB+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
7409.	Aphc4h8+phc4h8qjC=phc4h8ojA+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
7410.	Dphc4h8+phc4h8qjB=phc4h8ojD+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
7411.	Cphc4h8+phc4h8qjB=phc4h8ojC+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
7412.	Bphc4h8+phc4h8qjB=phc4h8ojB+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
7413.	Aphc4h8+phc4h8qjB=phc4h8ojA+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
7414.	Dphc4h8+phc4h8qjA=phc4h8ojD+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
7415.	Cphc4h8+phc4h8qjA=phc4h8ojC+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
7416.	Bphc4h8+phc4h8qjA=phc4h8ojB+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
7417.	Aphc4h8+phc4h8qjA=phc4h8ojA+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
7418.	phc4h8ojD=phhco+nc3h7	7.94E+14	0.0	15300.0
7419.	phc4h8ojC=phch2+ethco	7.94E+14	0.0	15300.0
7420.	phc4h8ojC=phch2hco+c2h5	7.94E+14	0.0	15300.0
7421.	phc4h8ojB=ch3+phc2h4hco	7.94E+14	0.0	15300.0
7422.	phc4h8ojB=ch3hco+Aphc2h4	7.94E+14	0.0	15300.0
7423.	phc4h8ojA=ch2o+pbzjA	1.00E+15	0.0	21600.0
7424.	phc4h8qjD=bbzqDrD	3.65E+13	0.0	32000.0
7425.	phc4h8qjD=bbzqDrC	5.96E+12	0.0	27900.0
7426.	phc4h8qjD=bbzqDrB	7.45E+11	0.0	22150.0
7427.	phc4h8qjD=bbzqDrA	1.39E+11	0.0	21100.0
7428.	phc4h8qjC=bbzqCrD	5.96E+12	0.0	27900.0
7429.	phc4h8qjC=bbzqCrC	3.65E+13	0.0	32000.0
7430.	phc4h8qjC=bbzqCrB	5.96E+12	0.0	27900.0
7431.	phc4h8qjC=bbzqCrA	1.10E+12	0.0	23900.0
7432.	phc4h8qjB=bbzqBrD	7.45E+11	0.0	15769.0
7433.	phc4h8qjB=bbzqBrC	5.96E+12	0.0	27900.0
7434.	phc4h8qjB=bbzqBrB	3.65E+13	0.0	32000.0
7435.	phc4h8qjB=bbzqBrA	8.90E+12	0.0	29700.0
7436.	phc4h8qjA=bbzqArD	9.31E+10	0.0	12969.0
7437.	phc4h8qjA=bbzqArC	7.45E+11	0.0	22150.0
7438.	phc4h8qjA=bbzqArB	5.96E+12	0.0	27900.0
7439.	phc4h8qjA=bbzqArA	3.65E+13	0.0	32000.0
7440.	phc4h8qjD+ho2=bbzqD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7441.	phc4h8qjC+ho2=bbzqC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7442.	phc4h8qjB+ho2=bbzqB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7443.	phc4h8qjA+ho2=bbzqA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7444.	phc4h8qjD+h2o2=bbzqD+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7445.	phc4h8qjC+h2o2=bbzqC+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7446.	phc4h8qjB+h2o2=bbzqB+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7447.	phc4h8qjA+h2o2=bbzqA+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7448.	phc4h8qjD+H2=bbzqD+H	3.01E+13	0.0	26030.0
7449.	phc4h8qjC+H2=bbzqC+H	3.01E+13	0.0	26030.0
7450.	phc4h8qjB+H2=bbzqB+H	3.01E+13	0.0	26030.0
7451.	phc4h8qjA+H2=bbzqA+H	3.01E+13	0.0	26030.0
7452.	phc4h8qjD+ch2o=bbzqD+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
7453.	phc4h8qjC+ch2o=bbzqC+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
7454.	phc4h8qjB+ch2o=bbzqB+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
7455.	phc4h8qjA+ch2o=bbzqA+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
7456.	phc4h8qjD+ch3hco=bbzqD+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
7457.	phc4h8qjC+ch3hco=bbzqC+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
7458.	phc4h8qjB+ch3hco=bbzqB+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
7459.	phc4h8qjA+ch3hco=bbzqA+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
7460.	phc4h8qjD+c2h6=bbzqD+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
7461.	phc4h8qjC+c2h6=bbzqC+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
7462.	phc4h8qjB+c2h6=bbzqB+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
7463.	phc4h8qjA+c2h6=bbzqA+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
7464.	phc4h8qjD+c3h8=bbzqD+ic3h7	2.00E+12	0.0	17000.0
7465.	phc4h8qjC+c3h8=bbzqC+ic3h7	2.00E+12	0.0	17000.0
7466.	phc4h8qjB+c3h8=bbzqB+ic3h7	2.00E+12	0.0	17000.0
7467.	phc4h8qjA+c3h8=bbzqA+ic3h7	2.00E+12	0.0	17000.0
7468.	phc4h8qjD+c3h8=bbzqD+nc3h7	1.70E+13	0.0	20460.0
7469.	phc4h8qjC+c3h8=bbzqC+nc3h7	1.70E+13	0.0	20460.0
7470.	phc4h8qjB+c3h8=bbzqB+nc3h7	1.70E+13	0.0	20460.0
7471.	phc4h8qjA+c3h8=bbzqA+nc3h7	1.70E+13	0.0	20460.0
7472.	phc4h8qjD+c2h4=bbzqD+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
7473.	phc4h8qjC+c2h4=bbzqC+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
7474.	phc4h8qjB+c2h4=bbzqB+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
7475.	phc4h8qjA+c2h4=bbzqA+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
7476.	phc4h8qjD+ethco=bbzqD+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
7477.	phc4h8qjC+ethco=bbzqC+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
7478.	phc4h8qjB+ethco=bbzqB+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
7479.	phc4h8qjA+ethco=bbzqA+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
7480.	phc4h8qjD+acrol=bbzqD+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
7481.	phc4h8qjC+acrol=bbzqC+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
7482.	phc4h8qjB+acrol=bbzqB+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
7483.	phc4h8qjA+acrol=bbzqA+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
7484.	phc4h8qjD+ch3oh=bbzqD+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
7485.	phc4h8qjC+ch3oh=bbzqC+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
7486.	phc4h8qjB+ch3oh=bbzqB+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
7487.	phc4h8qjA+ch3oh=bbzqA+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
7488.	phc4h8qjD+c3h6=bbzqD+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
7489.	phc4h8qjC+c3h6=bbzqC+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
7490.	phc4h8qjB+c3h6=bbzqB+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
7491.	phc4h8qjA+c3h6=bbzqA+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
7492.	phc4h8qjD+ch4=bbzqD+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0
7493.	phc4h8qjC+ch4=bbzqC+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0
7494.	phc4h8qjB+ch4=bbzqB+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0
7495.	phc4h8qjA+ch4=bbzqA+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0
7496.	phc4h8qjD+phhco=bbzqD+phco	5.60E+12	0.0	13600.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

7497.	phc4h8qjC+phhco=bbzqC+phco	5.60E+12	0.0	13600.0
7498.	phc4h8qjB+phhco=bbzqB+phco	5.60E+12	0.0	13600.0
7499.	phc4h8qjA+phhco=bbzqA+phco	5.60E+12	0.0	13600.0
7500.	phc4h8qjD+phch2hco=bbzqD+phch2co	2.80E+12	0.0	13600.0
7501.	phc4h8qjC+phch2hco=bbzqC+phch2co	2.80E+12	0.0	13600.0
7502.	phc4h8qjB+phch2hco=bbzqB+phch2co	2.80E+12	0.0	13600.0
7503.	phc4h8qjA+phch2hco=bbzqA+phch2co	2.80E+12	0.0	13600.0
7504.	phc4h8qjD+phc2h4hco=bbzqD+phc2h4co	2.00E+11	0.0	9500.0
7505.	phc4h8qjC+phc2h4hco=bbzqC+phc2h4co	2.00E+11	0.0	9500.0
7506.	phc4h8qjB+phc2h4hco=bbzqB+phc2h4co	2.00E+11	0.0	9500.0
7507.	phc4h8qjA+phc2h4hco=bbzqA+phc2h4co	2.00E+11	0.0	9500.0
7508.	phc4h9+phc4h8qjD=Dphc4h8+bbzqC	2.66E+11	0.0	11269.0
7509.	phc4h9+phc4h8qjD=Cphc4h8+bbzqC	1.12E+13	0.0	17700.0
7510.	phc4h9+phc4h8qjD=Bphc4h8+bbzqC	1.12E+13	0.0	17700.0
7511.	phc4h9+phc4h8qjD=Aphc4h8+bbzqC	1.70E+13	0.0	20460.0
7512.	phc4h9+phc4h8qjC=Dphc4h8+bbzqC	2.66E+11	0.0	11269.0
7513.	phc4h9+phc4h8qjC=Cphc4h8+bbzqC	1.12E+13	0.0	17700.0
7514.	phc4h9+phc4h8qjC=Bphc4h8+bbzqC	1.12E+13	0.0	17700.0
7515.	phc4h9+phc4h8qjC=Aphc4h8+bbzqC	1.70E+13	0.0	20460.0
7516.	phc4h9+phc4h8qjB=Dphc4h8+bbzqB	2.66E+11	0.0	11269.0
7517.	phc4h9+phc4h8qjB=Cphc4h8+bbzqB	1.12E+13	0.0	17700.0
7518.	phc4h9+phc4h8qjB=Bphc4h8+bbzqB	1.12E+13	0.0	17700.0
7519.	phc4h9+phc4h8qjB=Aphc4h8+bbzqB	1.70E+13	0.0	20460.0
7520.	phc4h9+phc4h8qjA=Dphc4h8+bbzqA	2.66E+11	0.0	11269.0
7521.	phc4h9+phc4h8qjA=Cphc4h8+bbzqA	1.12E+13	0.0	17700.0
7522.	phc4h9+phc4h8qjA=Bphc4h8+bbzqA	1.12E+13	0.0	17700.0
7523.	phc4h9+phc4h8qjA=Aphc4h8+bbzqA	1.70E+13	0.0	20460.0
7524.	phc4h8qjD+ch3=phc4h8ojD+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7525.	phc4h8qjC+ch3=phc4h8ojC+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7526.	phc4h8qjB+ch3=phc4h8ojB+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7527.	phc4h8qjA+ch3=phc4h8ojA+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7528.	phc4h8qjD+c2h5=phc4h8ojD+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7529.	phc4h8qjC+c2h5=phc4h8ojC+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7530.	phc4h8qjB+c2h5=phc4h8ojB+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7531.	phc4h8qjA+c2h5=phc4h8ojA+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7532.	phc4h8qjD+nc3h7=phc4h8ojD+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7533.	phc4h8qjC+nc3h7=phc4h8ojC+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7534.	phc4h8qjB+nc3h7=phc4h8ojB+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7535.	phc4h8qjA+nc3h7=phc4h8ojA+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7536.	phc4h8qjD+ic3h7=phc4h8ojD+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7537.	phc4h8qjC+ic3h7=phc4h8ojC+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7538.	phc4h8qjB+ic3h7=phc4h8ojB+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7539.	phc4h8qjA+ic3h7=phc4h8ojA+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7540.	phc4h8qjD+ac3h5=phc4h8ojD+c3h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7541.	phc4h8qjC+ac3h5=phc4h8ojC+c3h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7542.	phc4h8qjB+ac3h5=phc4h8ojB+c3h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7543.	phc4h8qjA+ac3h5=phc4h8ojA+c3h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7544.	phc4h8qjD+ho2=phc4h8ojD+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7545.	phc4h8qjC+ho2=phc4h8ojC+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7546.	phc4h8qjB+ho2=phc4h8ojB+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7547.	phc4h8qjA+ho2=phc4h8ojA+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7548.	phc4h8qjD+ch3o2=phc4h8ojD+ch3o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7549.	phc4h8qjC+ch3o2=phc4h8ojC+ch3o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7550.	phc4h8qjB+ch3o2=phc4h8ojB+ch3o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7551.	phc4h8qjA+ch3o2=phc4h8ojA+ch3o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7552.	phc4h8qjD+c2h5o2=phc4h8ojD+c2h5o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7553.	phc4h8qjC+c2h5o2=phc4h8ojC+c2h5o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7554.	phc4h8qjB+c2h5o2=phc4h8ojB+c2h5o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7555.	phc4h8qjA+c2h5o2=phc4h8ojA+c2h5o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7556.	phc4h8qjD+nc3h7o2=phc4h8ojD+nc3h7o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7557.	phc4h8qjC+nc3h7o2=phc4h8ojC+nc3h7o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7558.	phc4h8qjB+nc3h7o2=phc4h8ojB+nc3h7o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7559.	phc4h8qjA+nc3h7o2=phc4h8ojA+nc3h7o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7560.	phc4h8qjD+ic3h7o2=phc4h8ojD+ic3h7o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7561.	phc4h8qjC+ic3h7o2=phc4h8ojC+ic3h7o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7562.	phc4h8qjB+ic3h7o2=phc4h8ojB+ic3h7o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7563.	phc4h8qjA+ic3h7o2=phc4h8ojA+ic3h7o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7564.	bbzqD=phc4h8ojD+oh	1.72E+20	-1.6	46050.0
7565.	bbzqC=phc4h8ojC+oh	1.72E+20	-1.6	46050.0
7566.	bbzqB=phc4h8ojB+oh	1.72E+20	-1.6	46050.0
7567.	bbzqA=phc4h8ojA+oh	1.72E+20	-1.6	46050.0
7568.	phc4h7-3+ho2=bbzqDrC	7.00E+10	0.0	7800.0
7569.	phc4h7-3+ho2=bbzqCrD	7.00E+10	0.0	7800.0
7570.	phc4h7-2+ho2=bbzqCrB	7.00E+10	0.0	7800.0
7571.	phc4h7-2+ho2=bbzqBrC	7.00E+10	0.0	7800.0
7572.	phc4h7-1+ho2=bbzqBrA	7.00E+10	0.0	7800.0
7573.	phc4h7-1+ho2=bbzqArB	7.00E+10	0.0	7800.0
7574.	phc4h7-3+c2h5o2=phc4h7o-CD+c2h5o	5.62E+11	0.0	12310.0
7575.	phc4h7-2+c2h5o2=phc4h7o-BC+c2h5o	5.62E+11	0.0	12310.0
7576.	phc4h7-1+c2h5o2=phc4h7o-AB+c2h5o	1.00E+12	0.0	14340.0
7577.	phc4h7-3+nc3h7o2=phc4h7o-CD+nc3h7o	5.62E+11	0.0	12310.0
7578.	phc4h7-2+nc3h7o2=phc4h7o-BC+nc3h7o	5.62E+11	0.0	12310.0
7579.	phc4h7-1+nc3h7o2=phc4h7o-AB+nc3h7o	1.00E+12	0.0	14340.0
7580.	phc4h7-3+ic3h7o2=phc4h7o-CD+ic3h7o	5.62E+11	0.0	12310.0
7581.	phc4h7-2+ic3h7o2=phc4h7o-BC+ic3h7o	5.62E+11	0.0	12310.0
7582.	phc4h7-1+ic3h7o2=phc4h7o-AB+ic3h7o	1.00E+12	0.0	14340.0
7583.	phc4h7-3+ch3o2=phc4h7o-CD+ch3o	5.62E+11	0.0	12310.0
7584.	phc4h7-2+ch3o2=phc4h7o-BC+ch3o	5.62E+11	0.0	12310.0
7585.	phc4h7-1+ch3o2=phc4h7o-AB+ch3o	1.00E+12	0.0	14340.0
7586.	phc4h7-3+phc4h8qjD=phc4h7o-CD+phc4h8ojD	5.62E+11	0.0	12310.0
7587.	phc4h7-2+phc4h8qjD=phc4h7o-BC+phc4h8ojD	5.62E+11	0.0	12310.0
7588.	phc4h7-1+phc4h8qjD=phc4h7o-AB+phc4h8ojD	1.00E+12	0.0	14340.0
7589.	phc4h7-3+phc4h8qjC=phc4h7o-CD+phc4h8ojC	5.62E+11	0.0	12310.0
7590.	phc4h7-2+phc4h8qjC=phc4h7o-BC+phc4h8ojC	5.62E+11	0.0	12310.0
7591.	phc4h7-1+phc4h8qjC=phc4h7o-AB+phc4h8ojC	1.00E+12	0.0	14340.0
7592.	phc4h7-3+phc4h8qjB=phc4h7o-CD+phc4h8ojB	5.62E+11	0.0	12310.0
7593.	phc4h7-2+phc4h8qjB=phc4h7o-BC+phc4h8ojB	5.62E+11	0.0	12310.0
7594.	phc4h7-1+phc4h8qjB=phc4h7o-AB+phc4h8ojB	1.00E+12	0.0	14340.0
7595.	phc4h7-3+phc4h8qjA=phc4h7o-CD+phc4h8ojA	5.62E+11	0.0	12310.0
7596.	phc4h7-2+phc4h8qjA=phc4h7o-BC+phc4h8ojA	5.62E+11	0.0	12310.0
7597.	phc4h7-1+phc4h8qjA=phc4h7o-AB+phc4h8ojA	5.62E+11	0.0	12310.0
7598.	phc4h7-3+oh=bbzohCrD	4.75E+12	0.0	-782.0
7599.	phc4h7-3+oh=bbzohDrC	4.75E+12	0.0	-782.0
7600.	phc4h7-2+oh=bbzohBrC	4.75E+12	0.0	-782.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

7601.	phc4h7-2+oh=bbzohCrB	4.75E+12	0.0	-782.0
7602.	phc4h7-1+oh=bbzohArB	4.75E+12	0.0	-782.0
7603.	phc4h7-1+oh=bbzohBrA	4.75E+12	0.0	-782.0
7604.	phc4h7-3+oh=phhco+nc3h7	2.60E+13	0.0	0.0
7605.	phc4h7-3+oh=phch2+ethco	2.60E+13	0.0	0.0
7606.	phc4h7-2+oh=phch2hco+c2h5	2.60E+13	0.0	0.0
7607.	phc4h7-2+oh=Aphc2h4+ch3hco	2.60E+13	0.0	0.0
7608.	phc4h7-1+oh=phc2h4hco+ch3	2.60E+13	0.0	0.0
7609.	phc4h7-1+oh=pbzjA+ch2o	2.60E+13	0.0	0.0
7610.	phc4h7-3+oh=Bphc4h6-3+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
7611.	phc4h7-2+oh=Bphc4h6-3+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
7612.	phc4h7-1+oh=Cphc4h6-1+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
7613.	phc4h7-1+oh=Dphc4h6-1+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
7614.	phc4h7-3+ho2=Bphc4h6-3+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
7615.	phc4h7-2+ho2=Bphc4h6-3+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
7616.	phc4h7-1+ho2=Cphc4h6-1+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
7617.	phc4h7-1+ho2=Dphc4h6-1+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
7618.	phc4h7-3+Dphc4h8=Bphc4h6-3+phc4h9	1.00E+11	0.0	7300.0
7619.	phc4h7-2+Dphc4h8=Bphc4h6-3+phc4h9	6.72E+10	0.0	7214.0
7620.	phc4h7-1+Dphc4h8=Cphc4h6-1+phc4h9	1.00E+11	0.0	7300.0
7621.	phc4h7-1+Dphc4h8=Dphc4h6-1+phc4h9	6.72E+10	0.0	7214.0
7622.	phc4h7-3+Cphc4h8=Bphc4h6-3+phc4h9	1.00E+11	0.0	7300.0
7623.	phc4h7-2+Cphc4h8=Bphc4h6-3+phc4h9	6.72E+10	0.0	7214.0
7624.	phc4h7-1+Cphc4h8=Cphc4h6-1+phc4h9	1.00E+11	0.0	7300.0
7625.	phc4h7-1+Cphc4h8=Dphc4h6-1+phc4h9	6.72E+10	0.0	7214.0
7626.	phc4h7-3+Bphc4h8=Bphc4h6-3+phc4h9	1.00E+11	0.0	7300.0
7627.	phc4h7-2+Bphc4h8=Bphc4h6-3+phc4h9	6.72E+10	0.0	7214.0
7628.	phc4h7-1+Bphc4h8=Cphc4h6-1+phc4h9	1.00E+11	0.0	7300.0
7629.	phc4h7-1+Bphc4h8=Dphc4h6-1+phc4h9	6.72E+10	0.0	7214.0
7630.	phc4h7-3+Aphc4h8=Bphc4h6-3+phc4h9	1.00E+11	0.0	7300.0
7631.	phc4h7-2+Aphc4h8=Bphc4h6-3+phc4h9	6.72E+10	0.0	7214.0
7632.	phc4h7-1+Aphc4h8=Cphc4h6-1+phc4h9	1.00E+11	0.0	7300.0
7633.	phc4h7-1+Aphc4h8=Dphc4h6-1+phc4h9	6.72E+10	0.0	7214.0
7634.	phc4h7-3+phc4h8qjD=Bphc4h6-3+bbzqD	1.40E+12	0.0	14900.0
7635.	phc4h7-2+phc4h8qjD=Bphc4h6-3+bbzqD	2.66E+11	0.0	11269.0
7636.	phc4h7-1+phc4h8qjD=Cphc4h6-1+bbzqD	1.40E+12	0.0	14900.0
7637.	phc4h7-1+phc4h8qjD=Dphc4h6-1+bbzqD	2.66E+11	0.0	11269.0
7638.	phc4h7-3+phc4h8qjC=Bphc4h6-3+bbzqC	1.40E+12	0.0	14900.0
7639.	phc4h7-2+phc4h8qjC=Bphc4h6-3+bbzqC	2.66E+11	0.0	11269.0
7640.	phc4h7-1+phc4h8qjC=Cphc4h6-1+bbzqC	1.40E+12	0.0	14900.0
7641.	phc4h7-1+phc4h8qjC=Dphc4h6-1+bbzqC	2.66E+11	0.0	11269.0
7642.	phc4h7-3+phc4h8qjB=Bphc4h6-3+bbzqB	1.40E+12	0.0	14900.0
7643.	phc4h7-2+phc4h8qjB=Bphc4h6-3+bbzqB	2.66E+11	0.0	11269.0
7644.	phc4h7-1+phc4h8qjB=Cphc4h6-1+bbzqB	1.40E+12	0.0	14900.0
7645.	phc4h7-1+phc4h8qjB=Dphc4h6-1+bbzqB	2.66E+11	0.0	11269.0
7646.	phc4h7-3+phc4h8qjA=Bphc4h6-3+bbzqA	1.40E+12	0.0	14900.0
7647.	phc4h7-2+phc4h8qjA=Bphc4h6-3+bbzqA	2.66E+11	0.0	11269.0
7648.	phc4h7-1+phc4h8qjA=Cphc4h6-1+bbzqA	1.40E+12	0.0	14900.0
7649.	phc4h7-1+phc4h8qjA=Dphc4h6-1+bbzqA	2.66E+11	0.0	11269.0
7650.	phc4h7-3+c2h5=Bphc4h6-3+c2h6	1.00E+11	0.0	7300.0
7651.	phc4h7-2+c2h5=Bphc4h6-3+c2h6	6.72E+10	0.0	7214.0
7652.	phc4h7-1+c2h5=Cphc4h6-1+c2h6	1.00E+11	0.0	7300.0
7653.	phc4h7-1+c2h5=Dphc4h6-1+c2h6	6.72E+10	0.0	7214.0
7654.	phc4h7-3+ic3h7=Bphc4h6-3+c3h8	1.00E+11	0.0	8300.0
7655.	phc4h7-2+ic3h7=Bphc4h6-3+c3h8	6.72E+10	0.0	8214.0
7656.	phc4h7-1+ic3h7=Cphc4h6-1+c3h8	1.00E+11	0.0	8300.0
7657.	phc4h7-1+ic3h7=Dphc4h6-1+c3h8	6.72E+10	0.0	8214.0
7658.	phc4h7-3+nc3h7=Bphc4h6-3+c3h8	1.00E+11	0.0	8300.0
7659.	phc4h7-2+nc3h7=Bphc4h6-3+c3h8	6.72E+10	0.0	7214.0
7660.	phc4h7-1+nc3h7=Cphc4h6-1+c3h8	1.00E+11	0.0	7300.0
7661.	phc4h7-1+nc3h7=Dphc4h6-1+c3h8	6.72E+10	0.0	7214.0
7662.	phc4h7-3+c2h3=Bphc4h6-3+c2h4	1.00E+11	0.0	8300.0
7663.	phc4h7-2+c2h3=Bphc4h6-3+c2h4	2.60E+12	0.0	6012.0
7664.	phc4h7-1+c2h3=Cphc4h6-1+c2h4	1.00E+11	0.0	8300.0
7665.	phc4h7-1+c2h3=Dphc4h6-1+c2h4	2.60E+12	0.0	6012.0
7666.	phc4h7-3+c2h5o2=Bphc4h6-3+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
7667.	phc4h7-2+c2h5o2=Bphc4h6-3+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7668.	phc4h7-1+c2h5o2=Cphc4h6-1+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
7669.	phc4h7-1+c2h5o2=Dphc4h6-1+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7670.	phc4h7-3+ac3h5=Bphc4h6-3+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
7671.	phc4h7-2+ac3h5=Bphc4h6-3+c3h6	2.80E+12	0.0	11219.0
7672.	phc4h7-1+ac3h5=Cphc4h6-1+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
7673.	phc4h7-1+ac3h5=Dphc4h6-1+c3h6	2.80E+12	0.0	11219.0
7674.	phc4h7-3+nc3h7o2=Bphc4h6-3+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
7675.	phc4h7-2+nc3h7o2=Bphc4h6-3+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7676.	phc4h7-1+nc3h7o2=Cphc4h6-1+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
7677.	phc4h7-1+nc3h7o2=Dphc4h6-1+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7678.	phc4h7-3+ic3h7o2=Bphc4h6-3+ic3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
7679.	phc4h7-2+ic3h7o2=Bphc4h6-3+ic3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7680.	phc4h7-1+ic3h7o2=Cphc4h6-1+ic3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
7681.	phc4h7-1+ic3h7o2=Dphc4h6-1+ic3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7682.	phc4h7-3+ch3=Bphc4h6-3+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
7683.	phc4h7-2+ch3=Bphc4h6-3+ch4	1.90E+12	0.0	9010.0
7684.	phc4h7-1+ch3=Cphc4h6-1+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
7685.	phc4h7-1+ch3=Dphc4h6-1+ch4	1.90E+12	0.0	9010.0
7686.	phc4h7-3+ch3o2=Bphc4h6-3+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
7687.	phc4h7-2+ch3o2=Bphc4h6-3+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7688.	phc4h7-1+ch3o2=Cphc4h6-1+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
7689.	phc4h7-1+ch3o2=Dphc4h6-1+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7690.	phc4h7-3+H=Bphc4h6-3+H2	5.00E+13	0.0	3900.0
7691.	phc4h7-2+H=Bphc4h6-3+H2	2.63E+14	0.0	8820.0
7692.	phc4h7-1+H=Cphc4h6-1+H2	5.00E+13	0.0	3900.0
7693.	phc4h7-1+H=Dphc4h6-1+H2	2.63E+14	0.0	8820.0
7694.	phc4h7-3+hco3=Bphc4h6-3+hco3h	1.40E+12	0.0	14900.0
7695.	phc4h7-2+hco3=Bphc4h6-3+hco3h	2.66E+11	0.0	11269.0
7696.	phc4h7-1+hco3=Cphc4h6-1+hco3h	1.40E+12	0.0	14900.0
7697.	phc4h7-1+hco3=Dphc4h6-1+hco3h	2.66E+11	0.0	11269.0
7698.	phc4h7-3+O=Bphc4h6-3+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
7699.	phc4h7-2+O=Bphc4h6-3+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
7700.	phc4h7-1+O=Cphc4h6-1+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
7701.	phc4h7-1+O=Dphc4h6-1+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
7702.	phc4h7o-CD+ch3=bbzoCrD+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
7703.	phc4h7o-CD+ch3=bbzoDrC+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
7704.	phc4h7o-BD+ch3=bbzoBrD+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

7705.	phc4h7o-BD+ch3=bbzoDrB+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
7706.	phc4h7o-AD+ch3=bbzoArD+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
7707.	phc4h7o-AD+ch3=bbzoDrA+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
7708.	phc4h7o-BC+ch3=bbzoBrC+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
7709.	phc4h7o-BC+ch3=bbzoCrB+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
7710.	phc4h7o-AC+ch3=bbzoArC+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
7711.	phc4h7o-AC+ch3=bbzoCrA+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
7712.	phc4h7o-AB+ch3=bbzoArB+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
7713.	phc4h7o-AB+ch3=bbzoBrA+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
7714.	phc4h7o-CD+ch3o2=bbzoCrD+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
7715.	phc4h7o-CD+ch3o2=bbzoDrC+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
7716.	phc4h7o-BD+ch3o2=bbzoBrD+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
7717.	phc4h7o-BD+ch3o2=bbzoDrB+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
7718.	phc4h7o-AD+ch3o2=bbzoArD+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
7719.	phc4h7o-AD+ch3o2=bbzoDrA+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
7720.	phc4h7o-BC+ch3o2=bbzoBrC+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
7721.	phc4h7o-BC+ch3o2=bbzoCrB+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
7722.	phc4h7o-AC+ch3o2=bbzoArC+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
7723.	phc4h7o-AC+ch3o2=bbzoCrA+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
7724.	phc4h7o-AB+ch3o2=bbzoArB+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
7725.	phc4h7o-AB+ch3o2=bbzoBrA+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
7726.	phc4h7o-CD+H=bbzoCrD+H2	2.00E+13	0.0	8300.0
7727.	phc4h7o-CD+H=bbzoDrC+H2	2.00E+13	0.0	8300.0
7728.	phc4h7o-BD+H=bbzoBrD+H2	2.00E+13	0.0	8300.0
7729.	phc4h7o-BD+H=bbzoDrB+H2	2.00E+13	0.0	8300.0
7730.	phc4h7o-AD+H=bbzoArD+H2	2.00E+13	0.0	8300.0
7731.	phc4h7o-AD+H=bbzoDrA+H2	2.00E+13	0.0	8300.0
7732.	phc4h7o-BC+H=bbzoBrC+H2	2.00E+13	0.0	8300.0
7733.	phc4h7o-BC+H=bbzoCrB+H2	2.00E+13	0.0	8300.0
7734.	phc4h7o-AC+H=bbzoArC+H2	2.00E+13	0.0	8300.0
7735.	phc4h7o-AC+H=bbzoCrA+H2	2.00E+13	0.0	8300.0
7736.	phc4h7o-AB+H=bbzoArB+H2	2.00E+13	0.0	8300.0
7737.	phc4h7o-AB+H=bbzoBrA+H2	2.00E+13	0.0	8300.0
7738.	phc4h7o-CD+ho2=bbzoCrD+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
7739.	phc4h7o-CD+ho2=bbzoDrC+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
7740.	phc4h7o-BD+ho2=bbzoBrD+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
7741.	phc4h7o-BD+ho2=bbzoDrB+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
7742.	phc4h7o-AD+ho2=bbzoArD+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
7743.	phc4h7o-AD+ho2=bbzoDrA+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
7744.	phc4h7o-BC+ho2=bbzoBrC+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
7745.	phc4h7o-BC+ho2=bbzoCrB+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
7746.	phc4h7o-AC+ho2=bbzoArC+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
7747.	phc4h7o-AC+ho2=bbzoCrA+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
7748.	phc4h7o-AB+ho2=bbzoArB+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
7749.	phc4h7o-AB+ho2=bbzoBrA+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
7750.	phc4h7o-CD+O=bbzoCrD+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7751.	phc4h7o-CD+O=bbzoDrC+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7752.	phc4h7o-BD+O=bbzoBrD+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7753.	phc4h7o-BD+O=bbzoDrB+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7754.	phc4h7o-AD+O=bbzoArD+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7755.	phc4h7o-AD+O=bbzoDrA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7756.	phc4h7o-BC+O=bbzoBrC+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7757.	phc4h7o-BC+O=bbzoCrB+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7758.	phc4h7o-AC+O=bbzoArC+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7759.	phc4h7o-AC+O=bbzoCrA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7760.	phc4h7o-AB+O=bbzoArB+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7761.	phc4h7o-AB+O=bbzoBrA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7762.	phc4h7o-CD+oh=bbzoCrD+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
7763.	phc4h7o-CD+oh=bbzoDrC+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
7764.	phc4h7o-BD+oh=bbzoBrD+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
7765.	phc4h7o-BD+oh=bbzoDrB+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
7766.	phc4h7o-AD+oh=bbzoArD+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
7767.	phc4h7o-AD+oh=bbzoDrA+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
7768.	phc4h7o-BC+oh=bbzoBrC+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
7769.	phc4h7o-BC+oh=bbzoCrB+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
7770.	phc4h7o-AC+oh=bbzoArC+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
7771.	phc4h7o-AC+oh=bbzoCrA+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
7772.	phc4h7o-AB+oh=bbzoArB+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
7773.	phc4h7o-AB+oh=bbzoBrA+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
7774.	acrol+phch2=bbzoArB	1.32E+04	2.5	6130.0
7775.	ch2co+Aphc2h4=bbzoBrA	1.76E+04	2.5	6130.0
7776.	ac3h5hco+c6h5=bbzoArC	1.32E+04	2.5	6130.0
7777.	hco+phc3h5-1=bbzoArC	1.00E+11	0.0	7800.0
7778.	c2h4+phch2co=bbzoCrA	1.00E+11	0.0	7800.0
7779.	styren+ch2hco=bbzoArD	1.32E+04	2.5	6130.0
7780.	c2h4+phcoch2=bbzoDrA	1.32E+04	2.5	6130.0
7781.	MVK+c6h5=bbzoBrC	1.32E+04	2.5	6130.0
7782.	phch2+ch3chco=bbzoCrB	1.76E+04	2.5	6130.0
7783.	styren+ch3co=bbzoBrD	1.00E+11	0.0	7800.0
7784.	phco+c3h6=bbzoDrB	1.00E+11	0.0	7800.0
7785.	bbzoCrD+O=phhco+c2h5co	2.00E+14	0.0	0.0
7786.	bbzoCrD+ho2=phhco+c2h5co+oh	1.00E+13	0.0	0.0
7787.	bbzoCrD+o2=phhco+c2h5+co2	1.23E+36	-7.2	33600.0
7788.	ch3+phcoc2h3=bbzoDrC	1.32E+04	2.5	6130.0
7789.	c6h5+ch2co=phch2co	1.76E+04	2.5	6130.0
7790.	bbzohCrD+o2=bbzohCqjD	4.58E+11	0.0	-378.0
7791.	bbzohDrC+o2=bbzohDqjC	2.00E+12	0.0	0.0
7792.	bbzohCrB+o2=bbzohCqjB	2.00E+12	0.0	0.0
7793.	bbzohBrC+o2=bbzohBqjC	2.00E+12	0.0	0.0
7794.	bbzohBrA+o2=bbzohBqjA	2.00E+12	0.0	0.0
7795.	bbzohArB+o2=bbzohAqjB	2.00E+12	0.0	0.0
7796.	bbzohCqjD=>phhco+ethco+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
7797.	bbzohDqjC=>phhco+ethco+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
7798.	bbzohCqjB=>phch2hco+ch3hco+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
7799.	bbzohBqjC=>phch2hco+ch3hco+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
7800.	bbzohBqjA=>phc2h4hco+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
7801.	bbzohAqjB=>phc2h4hco+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
7802.	bbzqDrC=>phc4h7o-CD+oh	2.95E+11	0.0	22000.0
7803.	bbzqDrB=>phc4h7o-BD+oh	2.50E+10	0.0	15250.0
7804.	bbzqDrA=>phc4h7o-AD+oh	5.20E+08	0.0	6500.0
7805.	bbzqCrD=>phc4h7o-CD+oh	2.95E+11	0.0	22000.0
7806.	bbzqCrB=>phc4h7o-BC+oh	2.95E+11	0.0	22000.0
7807.	bbzqCrA=>phc4h7o-AC+oh	2.50E+10	0.0	15250.0
7808.	bbzqBrD=>phc4h7o-BD+oh	2.50E+10	0.0	15250.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

7809.	bbzqBrC=>phc4h7o-BC+oh	2.95E+11	0.0	22000.0
7810.	bbzqBrA=>phc4h7o-AB+oh	2.95E+11	0.0	22000.0
7811.	bbzqArD=>phc4h7o-AD+oh	5.20E+08	0.0	6500.0
7812.	bbzqArC=>phc4h7o-AC+oh	2.50E+10	0.0	15250.0
7813.	bbzqArB=>phc4h7o-AB+oh	2.95E+11	0.0	22000.0
7814.	bbzqDrD=>bbzoD+oh	3.00E+11	0.0	22000.0
7815.	bbzqCrC=>bbzoC+oh	3.00E+11	0.0	22000.0
7816.	bbzqBrB=>bbzoB+oh	3.00E+11	0.0	22000.0
7817.	bbzqArA=>bbzoA+oh	3.00E+11	0.0	22000.0
7818.	bbzqDrB=phhco+c3h6+oh	5.00E+13	0.0	25500.0
7819.	bbzqCrA=phch2hco+c2h4+oh	5.00E+13	0.0	25500.0
7820.	bbzqBrD=styren+ch3hco+oh	5.00E+13	0.0	25500.0
7821.	bbzqArC=phc3h5-1+ch2o+oh	5.00E+13	0.0	25500.0
7822.	bbzqDrC+o2=bbzqDqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
7823.	bbzqDrB+o2=bbzqDqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
7824.	bbzqDrA+o2=bbzqDqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
7825.	bbzqCrD+o2=bbzqCqjD	2.43E+39	-9.0	8620.0
7826.	bbzqCrB+o2=bbzqCqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
7827.	bbzqCrA+o2=bbzqCqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
7828.	bbzqBrD+o2=bbzqBqjD	2.43E+39	-9.0	8620.0
7829.	bbzqBrC+o2=bbzqBqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
7830.	bbzqBrA+o2=bbzqBqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
7831.	bbzqArD+o2=bbzqAqjD	2.43E+39	-9.0	8620.0
7832.	bbzqArC+o2=bbzqAqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
7833.	bbzqArB+o2=bbzqAqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
7834.	bbzqDqjC=>bbzoDqC+oh	4.95E+11	0.0	24900.0
7835.	bbzqDqjB=>bbzoDqB+oh	8.23E+10	0.0	20900.0
7836.	bbzqDqjA=>bbzoDqA+oh	6.87E+09	0.0	18100.0
7837.	bbzqCqjD=>bbzoCqD+oh	4.95E+11	0.0	24900.0
7838.	bbzqCqjB=>bbzoCqB+oh	4.95E+11	0.0	24900.0
7839.	bbzqCqjA=>bbzoCqA+oh	4.12E+10	0.0	19150.0
7840.	bbzqBqjD=>bbzoBqD+oh	8.23E+10	0.0	20900.0
7841.	bbzqBqjC=>bbzoBqC+oh	4.95E+11	0.0	24900.0
7842.	bbzqBqjA=>bbzoBqA+oh	4.95E+11	0.0	24900.0
7843.	bbzqAqjD=>bbzoAqD+oh	6.87E+09	0.0	18100.0
7844.	bbzqAqjC=>bbzoAqC+oh	8.23E+10	0.0	20900.0
7845.	bbzqAqjB=>bbzoAqB+oh	9.88E+11	0.0	26700.0
7846.	Bphc4h6-3+ho2=bbze3ojB+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
7847.	Cphc4h6-1+ho2=bbze1ojC+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
7848.	Dphc4h6-1+ho2=bbze1ojD+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
7849.	Bphc4h6-3+c2h5o2=bbze3ojB+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7850.	Cphc4h6-1+c2h5o2=bbze1ojC+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7851.	Dphc4h6-1+c2h5o2=bbze1ojD+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7852.	Bphc4h6-3+nc3h7o2=bbze3ojB+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7853.	Cphc4h6-1+nc3h7o2=bbze1ojC+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7854.	Dphc4h6-1+nc3h7o2=bbze1ojD+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7855.	Bphc4h6-3+ic3h7o2=bbze3ojB+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7856.	Cphc4h6-1+ic3h7o2=bbze1ojC+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7857.	Dphc4h6-1+ic3h7o2=bbze1ojD+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7858.	Bphc4h6-3+ch3o2=bbze3ojB+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7859.	Cphc4h6-1+ch3o2=bbze1ojC+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7860.	Dphc4h6-1+ch3o2=bbze1ojD+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
7861.	Bphc4h6-3+phc4h8qjD=bbze3ojB+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
7862.	Cphc4h6-1+phc4h8qjD=bbze1ojC+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
7863.	Dphc4h6-1+phc4h8qjD=bbze1ojD+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
7864.	Bphc4h6-3+phc4h8qjC=bbze3ojB+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
7865.	Cphc4h6-1+phc4h8qjC=bbze1ojC+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
7866.	Dphc4h6-1+phc4h8qjC=bbze1ojD+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
7867.	Bphc4h6-3+phc4h8qjB=bbze3ojB+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
7868.	Cphc4h6-1+phc4h8qjB=bbze1ojC+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
7869.	Dphc4h6-1+phc4h8qjB=bbze1ojD+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
7870.	Bphc4h6-3+phc4h8qjA=bbze3ojB+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
7871.	Cphc4h6-1+phc4h8qjA=bbze1ojC+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
7872.	Dphc4h6-1+phc4h8qjA=bbze1ojD+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
7873.	Bphc4h6-3+o2=phc4h5+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
7874.	Cphc4h6-1+o2=phc4h5+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
7875.	Dphc4h6-1+o2=phc4h5+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
7876.	Bphc4h6-3+oh=phc4h5+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
7877.	Cphc4h6-1+oh=phc4h5+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
7878.	Dphc4h6-1+oh=phc4h5+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
7879.	Bphc4h6-3+ho2=phc4h5+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
7880.	Cphc4h6-1+ho2=phc4h5+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
7881.	Dphc4h6-1+ho2=phc4h5+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
7882.	Bphc4h6-3+Dphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
7883.	Cphc4h6-1+Dphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
7884.	Dphc4h6-1+Dphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
7885.	Bphc4h6-3+Cphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
7886.	Cphc4h6-1+Cphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
7887.	Dphc4h6-1+Cphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
7888.	Bphc4h6-3+Bphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
7889.	Cphc4h6-1+Bphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
7890.	Dphc4h6-1+Bphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
7891.	Bphc4h6-3+Aphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
7892.	Cphc4h6-1+Aphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
7893.	Dphc4h6-1+Aphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
7894.	Bphc4h6-3+phc4h8qjD=phc4h5+bbzqD	2.66E+11	0.0	11269.0
7895.	Cphc4h6-1+phc4h8qjD=phc4h5+bbzqD	2.66E+11	0.0	11269.0
7896.	Dphc4h6-1+phc4h8qjD=phc4h5+bbzqD	2.66E+11	0.0	11269.0
7897.	Bphc4h6-3+phc4h8qjC=phc4h5+bbzqC	2.66E+11	0.0	11269.0
7898.	Cphc4h6-1+phc4h8qjC=phc4h5+bbzqC	2.66E+11	0.0	11269.0
7899.	Dphc4h6-1+phc4h8qjC=phc4h5+bbzqC	2.66E+11	0.0	11269.0
7900.	Bphc4h6-3+phc4h8qjB=phc4h5+bbzqB	2.66E+11	0.0	11269.0
7901.	Cphc4h6-1+phc4h8qjB=phc4h5+bbzqB	2.66E+11	0.0	11269.0
7902.	Dphc4h6-1+phc4h8qjB=phc4h5+bbzqB	2.66E+11	0.0	11269.0
7903.	Bphc4h6-3+phc4h8qjA=phc4h5+bbzqA	2.66E+11	0.0	11269.0
7904.	Cphc4h6-1+phc4h8qjA=phc4h5+bbzqA	2.66E+11	0.0	11269.0
7905.	Dphc4h6-1+phc4h8qjA=phc4h5+bbzqA	2.66E+11	0.0	11269.0
7906.	Bphc4h6-3+c2h5=phc4h5+c2h6	3.98E+12	0.0	0.0
7907.	Cphc4h6-1+c2h5=phc4h5+c2h6	3.98E+12	0.0	0.0
7908.	Dphc4h6-1+c2h5=phc4h5+c2h6	3.98E+12	0.0	0.0
7909.	Bphc4h6-3+ic3h7=phc4h5+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
7910.	Cphc4h6-1+ic3h7=phc4h5+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
7911.	Dphc4h6-1+ic3h7=phc4h5+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
7912.	Bphc4h6-3+nc3h7=phc4h5+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

7913.	Cphc4h6-1+nc3h7=phc4h5+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
7914.	Dphc4h6-1+nc3h7=phc4h5+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
7915.	Bphc4h6-3+c2h3=phc4h5+c2h4	3.98E+12	0.0	0.0
7916.	Cphc4h6-1+c2h3=phc4h5+c2h4	3.98E+12	0.0	0.0
7917.	Dphc4h6-1+c2h3=phc4h5+c2h4	3.98E+12	0.0	0.0
7918.	Bphc4h6-3+c2h5o2=phc4h5+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7919.	Cphc4h6-1+c2h5o2=phc4h5+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7920.	Dphc4h6-1+c2h5o2=phc4h5+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7921.	Bphc4h6-3+ac3h5=phc4h5+c3h6	6.31E+12	0.0	0.0
7922.	Cphc4h6-1+ac3h5=phc4h5+c3h6	6.31E+12	0.0	0.0
7923.	Dphc4h6-1+ac3h5=phc4h5+c3h6	6.31E+12	0.0	0.0
7924.	Bphc4h6-3+nc3h7o2=phc4h5+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7925.	Cphc4h6-1+nc3h7o2=phc4h5+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7926.	Dphc4h6-1+nc3h7o2=phc4h5+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7927.	Bphc4h6-3+ic3h7o2=phc4h5+ic3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7928.	Cphc4h6-1+ic3h7o2=phc4h5+ic3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7929.	Dphc4h6-1+ic3h7o2=phc4h5+ic3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7930.	Bphc4h6-3+ch3=phc4h5+ch4	8.00E+12	0.0	0.0
7931.	Cphc4h6-1+ch3=phc4h5+ch4	8.00E+12	0.0	0.0
7932.	Dphc4h6-1+ch3=phc4h5+ch4	8.00E+12	0.0	0.0
7933.	Bphc4h6-3+ch3o2=phc4h5+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7934.	Cphc4h6-1+ch3o2=phc4h5+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7935.	Dphc4h6-1+ch3o2=phc4h5+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
7936.	Bphc4h6-3+H=phc4h5+H2	3.16E+13	0.0	0.0
7937.	Cphc4h6-1+H=phc4h5+H2	3.16E+13	0.0	0.0
7938.	Dphc4h6-1+H=phc4h5+H2	3.16E+13	0.0	0.0
7939.	Bphc4h6-3+hco3=phc4h5+hco3h	2.66E+11	0.0	11269.0
7940.	Cphc4h6-1+hco3=phc4h5+hco3h	2.66E+11	0.0	11269.0
7941.	Dphc4h6-1+hco3=phc4h5+hco3h	2.66E+11	0.0	11269.0
7942.	Bphc4h6-3+O=phc4h5+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
7943.	Cphc4h6-1+O=phc4h5+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
7944.	Dphc4h6-1+O=phc4h5+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
7945.	bbze3ojB=ASTYRYL+ch3hco	7.94E+14	0.0	19000.0
7946.	bbze3ojB=phc2h2hco+ch3	7.94E+14	0.0	19000.0
7947.	bbze1ojC=phch2hco+c2h3	7.94E+14	0.0	19000.0
7948.	bbze1ojC=phch2+acrol	7.94E+14	0.0	19000.0
7949.	bbze1ojD=phhco+ac3h5	7.94E+14	0.0	19000.0
7950.	bbzoDqC=>phco+ethco+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
7951.	bbzoDqB=>phcoch2+ch3hco+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
7952.	bbzoDqA=>phcoc2h4+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
7953.	bbzoCqD=>phhco+c2h5co+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
7954.	bbzoCqB=>phch2co+ch3hco+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
7955.	bbzoCqA=>phch2coch2+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
7956.	bbzoBqD=>phhco+ch2coch3+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
7957.	bbzoBqC=>phch2hco+ch3co+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
7958.	bbzoBqA=>phc2h4co+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
7959.	bbzoAqD=>phhco+ch2ch2hco+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
7960.	bbzoAqC=>phch2hco+ch2hco+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
7961.	bbzoAqB=>phc2h4hco+hco+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
7962.	phc4h9+Ac10h21=Aphc4h8+nc10h22	1.58E+11	0.0	12300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.00E+11	0.0	13700.0
7963.	phc4h9+Ac10h21=Bphc4h8+nc10h22	1.00E+11	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.00E+11	0.0	13700.0
7964.	phc4h9+Ac10h21=Cphc4h8+nc10h22	1.00E+11	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.00E+11	0.0	13700.0
7965.	phc4h9+Ac10h21=Dphc4h8+nc10h22	6.72E+10	0.0	7214.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.00E+11	0.0	13700.0
7966.	phc4h9+Bc10h21=Aphc4h8+nc10h22	1.58E+11	0.0	13300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
7967.	phc4h9+Bc10h21=Bphc4h8+nc10h22	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
7968.	phc4h9+Bc10h21=Cphc4h8+nc10h22	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
7969.	phc4h9+Bc10h21=Dphc4h8+nc10h22	6.72E+10	0.0	8214.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
7970.	phc4h9+Cc10h21=Aphc4h8+nc10h22	1.58E+11	0.0	13300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
7971.	phc4h9+Cc10h21=Bphc4h8+nc10h22	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
7972.	phc4h9+Cc10h21=Cphc4h8+nc10h22	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
7973.	phc4h9+Cc10h21=Dphc4h8+nc10h22	6.72E+10	0.0	8214.0
7974.	phc4h9+Dc10h21=Aphc4h8+nc10h22	1.58E+11	0.0	13300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
7975.	phc4h9+Dc10h21=Bphc4h8+nc10h22	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
7976.	phc4h9+Dc10h21=Cphc4h8+nc10h22	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
7977.	phc4h9+Dc10h21=Dphc4h8+nc10h22	6.72E+10	0.0	8214.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
7978.	phc4h9+Ec10h21=Aphc4h8+nc10h22	1.58E+11	0.0	13300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
7979.	phc4h9+Ec10h21=Bphc4h8+nc10h22	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
7980.	phc4h9+Ec10h21=Cphc4h8+nc10h22	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
7981.	phc4h9+Ec10h21=Dphc4h8+nc10h22	6.72E+10	0.0	8214.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
7982.	phc4h9+c10h21qjA=Aphc4h8+c10h21qA	1.70E+13	0.0	20460.0
7983.	phc4h9+c10h21qjA=Bphc4h8+c10h21qA	1.12E+13	0.0	17700.0
7984.	phc4h9+c10h21qjA=Cphc4h8+c10h21qA	1.12E+13	0.0	17700.0
7985.	phc4h9+c10h21qjA=Dphc4h8+c10h21qA	2.66E+11	0.0	11269.0
7986.	phc4h9+c10h21qjB=Aphc4h8+c10h21qB	1.70E+13	0.0	20460.0
7987.	phc4h9+c10h21qjB=Bphc4h8+c10h21qB	1.12E+13	0.0	17700.0
7988.	phc4h9+c10h21qjB=Cphc4h8+c10h21qB	1.12E+13	0.0	17700.0
7989.	phc4h9+c10h21qjB=Dphc4h8+c10h21qB	2.66E+11	0.0	11269.0
7990.	phc4h9+c10h21qjC=Aphc4h8+c10h21qC	1.70E+13	0.0	20460.0
7991.	phc4h9+c10h21qjC=Bphc4h8+c10h21qC	1.12E+13	0.0	17700.0
7992.	phc4h9+c10h21qjC=Cphc4h8+c10h21qC	1.12E+13	0.0	17700.0
7993.	phc4h9+c10h21qjC=Dphc4h8+c10h21qC	2.66E+11	0.0	11269.0
7994.	phc4h9+c10h21qjD=Aphc4h8+c10h21qD	1.70E+13	0.0	20460.0
7995.	phc4h9+c10h21qjD=Bphc4h8+c10h21qD	1.12E+13	0.0	17700.0
7996.	phc4h9+c10h21qjD=Cphc4h8+c10h21qD	1.12E+13	0.0	17700.0
7997.	phc4h9+c10h21qjD=Dphc4h8+c10h21qD	2.66E+11	0.0	11269.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

7998.	phc4h9+c10h21qjE=Aphc4h8+c10h21qE	1.70E+13	0.0	20460.0
7999.	phc4h9+c10h21qjE=Bphc4h8+c10h21qE	1.12E+13	0.0	17700.0
8000.	phc4h9+c10h21qjE=Cphc4h8+c10h21qE	1.12E+13	0.0	17700.0
8001.	phc4h9+c10h21qjE=Dphc4h8+c10h21qE	2.66E+11	0.0	11269.0
8002.	nc10h22+phc4h8qjA=bbzqA+Ac10h21	1.20E+13	0.0	20000.0
8003.	nc10h22+phc4h8qjA=bbzqA+Bc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8004.	nc10h22+phc4h8qjA=bbzqA+Cc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8005.	nc10h22+phc4h8qjA=bbzqA+Dc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8006.	nc10h22+phc4h8qjA=bbzqA+Ec10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8007.	nc10h22+phc4h8qjB=bbzqB+Ac10h21	1.20E+13	0.0	20000.0
8008.	nc10h22+phc4h8qjB=bbzqB+Bc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8009.	nc10h22+phc4h8qjB=bbzqB+Cc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8010.	nc10h22+phc4h8qjB=bbzqB+Dc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8011.	nc10h22+phc4h8qjB=bbzqB+Ec10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8012.	nc10h22+phc4h8qjC=bbzqC+Ac10h21	1.20E+13	0.0	20000.0
8013.	nc10h22+phc4h8qjC=bbzqC+Bc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8014.	nc10h22+phc4h8qjC=bbzqC+Cc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8015.	nc10h22+phc4h8qjC=bbzqC+Dc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8016.	nc10h22+phc4h8qjC=bbzqC+Ec10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8017.	nc10h22+phc4h8qjD=bbzqD+Ac10h21	1.20E+13	0.0	20000.0
8018.	nc10h22+phc4h8qjD=bbzqD+Bc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8019.	nc10h22+phc4h8qjD=bbzqD+Cc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8020.	nc10h22+phc4h8qjD=bbzqD+Dc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8021.	nc10h22+phc4h8qjD=bbzqD+Ec10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8022.	phc4h8qjD+Ac10h21=phc4h8ojD+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8023.	phc4h8qjC+Ac10h21=phc4h8ojC+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8024.	phc4h8qjB+Ac10h21=phc4h8ojB+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8025.	phc4h8qjA+Ac10h21=phc4h8ojA+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8026.	phc4h8qjD+Bc10h21=phc4h8ojD+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8027.	phc4h8qjC+Bc10h21=phc4h8ojC+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8028.	phc4h8qjB+Bc10h21=phc4h8ojB+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8029.	phc4h8qjA+Bc10h21=phc4h8ojA+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8030.	phc4h8qjD+Cc10h21=phc4h8ojD+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8031.	phc4h8qjC+Cc10h21=phc4h8ojC+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8032.	phc4h8qjB+Cc10h21=phc4h8ojB+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8033.	phc4h8qjA+Cc10h21=phc4h8ojA+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8034.	phc4h8qjD+Dc10h21=phc4h8ojD+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8035.	phc4h8qjC+Dc10h21=phc4h8ojC+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8036.	phc4h8qjB+Dc10h21=phc4h8ojB+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8037.	phc4h8qjA+Dc10h21=phc4h8ojA+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8038.	phc4h8qjD+Ec10h21=phc4h8ojD+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8039.	phc4h8qjC+Ec10h21=phc4h8ojC+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8040.	phc4h8qjB+Ec10h21=phc4h8ojB+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8041.	phc4h8qjA+Ec10h21=phc4h8ojA+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8042.	c10h21qjA+Aphc4h8=phc4h8ojA+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8043.	c10h21qjA+Bphc4h8=phc4h8ojB+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8044.	c10h21qjA+Cphc4h8=phc4h8ojC+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8045.	c10h21qjA+Dphc4h8=phc4h8ojD+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8046.	c10h21qjB+Aphc4h8=phc4h8ojA+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8047.	c10h21qjB+Bphc4h8=phc4h8ojB+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8048.	c10h21qjB+Cphc4h8=phc4h8ojC+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8049.	c10h21qjB+Dphc4h8=phc4h8ojD+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8050.	c10h21qjC+Aphc4h8=phc4h8ojA+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8051.	c10h21qjC+Bphc4h8=phc4h8ojB+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8052.	c10h21qjC+Cphc4h8=phc4h8ojC+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8053.	c10h21qjC+Dphc4h8=phc4h8ojD+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8054.	c10h21qjD+Aphc4h8=phc4h8ojA+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8055.	c10h21qjD+Bphc4h8=phc4h8ojB+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8056.	c10h21qjD+Cphc4h8=phc4h8ojC+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8057.	c10h21qjD+Dphc4h8=phc4h8ojD+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8058.	c10h21qjE+Aphc4h8=phc4h8ojA+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8059.	c10h21qjE+Bphc4h8=phc4h8ojB+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8060.	c10h21qjE+Cphc4h8=phc4h8ojC+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8061.	c10h21qjE+Dphc4h8=phc4h8ojD+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8062.	c10h21qjA+phc4h8qjA=phc4h8ojA+c10h21ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8063.	c10h21qjA+phc4h8qjB=phc4h8ojB+c10h21ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8064.	c10h21qjA+phc4h8qjC=phc4h8ojC+c10h21ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8065.	c10h21qjA+phc4h8qjD=phc4h8ojD+c10h21ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8066.	c10h21qjB+phc4h8qjA=phc4h8ojA+c10h21ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8067.	c10h21qjB+phc4h8qjB=phc4h8ojB+c10h21ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8068.	c10h21qjB+phc4h8qjC=phc4h8ojC+c10h21ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8069.	c10h21qjB+phc4h8qjD=phc4h8ojD+c10h21ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8070.	c10h21qjC+phc4h8qjA=phc4h8ojA+c10h21ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8071.	c10h21qjC+phc4h8qjB=phc4h8ojB+c10h21ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8072.	c10h21qjC+phc4h8qjC=phc4h8ojC+c10h21ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8073.	c10h21qjC+phc4h8qjD=phc4h8ojD+c10h21ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8074.	c10h21qjD+phc4h8qjA=phc4h8ojA+c10h21ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8075.	c10h21qjD+phc4h8qjB=phc4h8ojB+c10h21ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8076.	c10h21qjD+phc4h8qjC=phc4h8ojC+c10h21ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8077.	c10h21qjD+phc4h8qjD=phc4h8ojD+c10h21ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8078.	c10h21qjE+phc4h8qjA=phc4h8ojA+c10h21ojE+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8079.	c10h21qjE+phc4h8qjB=phc4h8ojB+c10h21ojE+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8080.	c10h21qjE+phc4h8qjC=phc4h8ojC+c10h21ojE+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8081.	c10h21qjE+phc4h8qjD=phc4h8ojD+c10h21ojE+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8082.	c10h20o-AB+Aphc4h8=phc4h9+Ac10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8083.	c10h20o-AB+Aphc4h8=phc4h9+Bc10h19oA	6.00E+11	0.0	11000.0
8084.	c10h20o-BC+Aphc4h8=phc4h9+Bc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8085.	c10h20o-BC+Aphc4h8=phc4h9+Cc10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8086.	c10h20o-CD+Aphc4h8=phc4h9+Cc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8087.	c10h20o-CD+Aphc4h8=phc4h9+Dc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8088.	c10h20o-DE+Aphc4h8=phc4h9+Dc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
8089.	c10h20o-DE+Aphc4h8=phc4h9+Ec10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8090.	c10h20o-EF+Aphc4h8=phc4h9+Fc10h19oE	1.20E+12	0.0	11000.0
8091.	c10h20o-AC+Aphc4h8=phc4h9+Cc10h19oA	6.00E+11	0.0	11000.0
8092.	c10h20o-AC+Aphc4h8=phc4h9+Fc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
8093.	c10h20o-BD+Aphc4h8=phc4h9+Dc10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8094.	c10h20o-BD+Aphc4h8=phc4h9+Bc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8095.	c10h20o-CE+Aphc4h8=phc4h9+Ec10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8096.	c10h20o-CE+Aphc4h8=phc4h9+Cc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
8097.	c10h20o-DF+Aphc4h8=phc4h9+Fc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8098.	c10h20o-DF+Aphc4h8=phc4h9+Dc10h19oF	6.00E+11	0.0	11000.0
8099.	c10h20o-AD+Aphc4h8=phc4h9+Ac10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8100.	c10h20o-BE+Aphc4h8=phc4h9+Ec10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8101.	c10h20o-BE+Aphc4h8=phc4h9+Bc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

8102.	c10h20o-CF+Aphc4h8=phc4h9+Fc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8103.	c10h20o-CF+Aphc4h8=phc4h9+Cc10h19oF	6.00E+11	0.0	11000.0
8104.	c10h20o-DG+Aphc4h8=phc4h9+Gc10h19oD	1.20E+12	0.0	11000.0
8105.	c10h20o-AE+Aphc4h8=phc4h9+Ac10h19oE	1.20E+12	0.0	11000.0
8106.	c10h20o-AE+Aphc4h8=phc4h9+Ec10h19oA	6.00E+11	0.0	11000.0
8107.	c10h20o-BF+Aphc4h8=phc4h9+Fc10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8108.	c10h20o-BF+Aphc4h8=phc4h9+Bc10h19oF	6.00E+11	0.0	11000.0
8109.	c10h20o-CG+Aphc4h8=phc4h9+Gc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8110.	c10h20o-CG+Aphc4h8=phc4h9+Hc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8111.	c10h20o-AB+Bphc4h8=phc4h9+Ac10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8112.	c10h20o-AB+Bphc4h8=phc4h9+Bc10h19oA	6.00E+11	0.0	11000.0
8113.	c10h20o-BC+Bphc4h8=phc4h9+Bc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8114.	c10h20o-BC+Bphc4h8=phc4h9+Cc10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8115.	c10h20o-CD+Bphc4h8=phc4h9+Cc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8116.	c10h20o-CD+Bphc4h8=phc4h9+Dc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8117.	c10h20o-DE+Bphc4h8=phc4h9+Dc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
8118.	c10h20o-DE+Bphc4h8=phc4h9+Ec10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8119.	c10h20o-EF+Bphc4h8=phc4h9+Fc10h19oE	1.20E+12	0.0	11000.0
8120.	c10h20o-AC+Bphc4h8=phc4h9+Cc10h19oA	6.00E+11	0.0	11000.0
8121.	c10h20o-AC+Bphc4h8=phc4h9+Fc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
8122.	c10h20o-BD+Bphc4h8=phc4h9+Dc10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8123.	c10h20o-BD+Bphc4h8=phc4h9+Bc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8124.	c10h20o-CE+Bphc4h8=phc4h9+Ec10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8125.	c10h20o-CE+Bphc4h8=phc4h9+Cc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
8126.	c10h20o-DF+Bphc4h8=phc4h9+Fc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8127.	c10h20o-DF+Bphc4h8=phc4h9+Dc10h19oF	6.00E+11	0.0	11000.0
8128.	c10h20o-AD+Bphc4h8=phc4h9+Ac10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8129.	c10h20o-BE+Bphc4h8=phc4h9+Ec10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8130.	c10h20o-BE+Bphc4h8=phc4h9+Bc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
8131.	c10h20o-CF+Bphc4h8=phc4h9+Fc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8132.	c10h20o-CF+Bphc4h8=phc4h9+Cc10h19oF	6.00E+11	0.0	11000.0
8133.	c10h20o-DG+Bphc4h8=phc4h9+Gc10h19oD	1.20E+12	0.0	11000.0
8134.	c10h20o-AE+Bphc4h8=phc4h9+Ac10h19oE	1.20E+12	0.0	11000.0
8135.	c10h20o-AE+Bphc4h8=phc4h9+Ec10h19oA	6.00E+11	0.0	11000.0
8136.	c10h20o-BF+Bphc4h8=phc4h9+Fc10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8137.	c10h20o-BF+Bphc4h8=phc4h9+Bc10h19oF	6.00E+11	0.0	11000.0
8138.	c10h20o-CG+Bphc4h8=phc4h9+Gc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8139.	c10h20o-CG+Bphc4h8=phc4h9+Hc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8140.	c10h20o-AB+Cphc4h8=phc4h9+Ac10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8141.	c10h20o-AB+Cphc4h8=phc4h9+Bc10h19oA	6.00E+11	0.0	11000.0
8142.	c10h20o-BC+Cphc4h8=phc4h9+Bc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8143.	c10h20o-BC+Cphc4h8=phc4h9+Cc10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8144.	c10h20o-CD+Cphc4h8=phc4h9+Cc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8145.	c10h20o-CD+Cphc4h8=phc4h9+Dc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8146.	c10h20o-DE+Cphc4h8=phc4h9+Dc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
8147.	c10h20o-DE+Cphc4h8=phc4h9+Ec10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8148.	c10h20o-EF+Cphc4h8=phc4h9+Fc10h19oE	1.20E+12	0.0	11000.0
8149.	c10h20o-AC+Cphc4h8=phc4h9+Cc10h19oA	6.00E+11	0.0	11000.0
8150.	c10h20o-AC+Cphc4h8=phc4h9+Fc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
8151.	c10h20o-BD+Cphc4h8=phc4h9+Dc10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8152.	c10h20o-BD+Cphc4h8=phc4h9+Bc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8153.	c10h20o-CE+Cphc4h8=phc4h9+Ec10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8154.	c10h20o-CE+Cphc4h8=phc4h9+Cc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
8155.	c10h20o-DF+Cphc4h8=phc4h9+Fc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8156.	c10h20o-DF+Cphc4h8=phc4h9+Dc10h19oF	6.00E+11	0.0	11000.0
8157.	c10h20o-AD+Cphc4h8=phc4h9+Ac10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8158.	c10h20o-BE+Cphc4h8=phc4h9+Ec10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8159.	c10h20o-BE+Cphc4h8=phc4h9+Bc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
8160.	c10h20o-CF+Cphc4h8=phc4h9+Fc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8161.	c10h20o-CF+Cphc4h8=phc4h9+Cc10h19oF	6.00E+11	0.0	11000.0
8162.	c10h20o-DG+Cphc4h8=phc4h9+Gc10h19oD	1.20E+12	0.0	11000.0
8163.	c10h20o-AE+Cphc4h8=phc4h9+Ac10h19oE	1.20E+12	0.0	11000.0
8164.	c10h20o-AE+Cphc4h8=phc4h9+Ec10h19oA	6.00E+11	0.0	11000.0
8165.	c10h20o-BF+Cphc4h8=phc4h9+Fc10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8166.	c10h20o-BF+Cphc4h8=phc4h9+Bc10h19oF	6.00E+11	0.0	11000.0
8167.	c10h20o-CG+Cphc4h8=phc4h9+Gc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8168.	c10h20o-CG+Cphc4h8=phc4h9+Hc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8169.	c10h20o-AB+Dphc4h8=phc4h9+Ac10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8170.	c10h20o-AB+Dphc4h8=phc4h9+Bc10h19oA	6.00E+11	0.0	11000.0
8171.	c10h20o-BC+Dphc4h8=phc4h9+Bc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8172.	c10h20o-BC+Dphc4h8=phc4h9+Cc10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8173.	c10h20o-CD+Dphc4h8=phc4h9+Cc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8174.	c10h20o-CD+Dphc4h8=phc4h9+Dc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8175.	c10h20o-DE+Dphc4h8=phc4h9+Dc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
8176.	c10h20o-DE+Dphc4h8=phc4h9+Ec10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8177.	c10h20o-EF+Dphc4h8=phc4h9+Fc10h19oE	1.20E+12	0.0	11000.0
8178.	c10h20o-AC+Dphc4h8=phc4h9+Cc10h19oA	6.00E+11	0.0	11000.0
8179.	c10h20o-AC+Dphc4h8=phc4h9+Fc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
8180.	c10h20o-BD+Dphc4h8=phc4h9+Dc10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8181.	c10h20o-BD+Dphc4h8=phc4h9+Bc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8182.	c10h20o-CE+Dphc4h8=phc4h9+Ec10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8183.	c10h20o-CE+Dphc4h8=phc4h9+Cc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
8184.	c10h20o-DF+Dphc4h8=phc4h9+Fc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8185.	c10h20o-DF+Dphc4h8=phc4h9+Dc10h19oF	6.00E+11	0.0	11000.0
8186.	c10h20o-AD+Dphc4h8=phc4h9+Ac10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8187.	c10h20o-BE+Dphc4h8=phc4h9+Ec10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8188.	c10h20o-BE+Dphc4h8=phc4h9+Bc10h19oE	6.00E+11	0.0	11000.0
8189.	c10h20o-CF+Dphc4h8=phc4h9+Fc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8190.	c10h20o-CF+Dphc4h8=phc4h9+Cc10h19oF	6.00E+11	0.0	11000.0
8191.	c10h20o-DG+Dphc4h8=phc4h9+Gc10h19oD	1.20E+12	0.0	11000.0
8192.	c10h20o-AE+Dphc4h8=phc4h9+Ac10h19oE	1.20E+12	0.0	11000.0
8193.	c10h20o-AE+Dphc4h8=phc4h9+Ec10h19oA	6.00E+11	0.0	11000.0
8194.	c10h20o-BF+Dphc4h8=phc4h9+Fc10h19oB	6.00E+11	0.0	11000.0
8195.	c10h20o-BF+Dphc4h8=phc4h9+Bc10h19oF	6.00E+11	0.0	11000.0
8196.	c10h20o-CG+Dphc4h8=phc4h9+Gc10h19oC	6.00E+11	0.0	11000.0
8197.	c10h20o-CG+Dphc4h8=phc4h9+Hc10h19oD	6.00E+11	0.0	11000.0
8198.	nc10h22+phch2=Ac10h21+toluen	7.94E+11	0.0	20500.0
8199.	nc10h22+phch2=Bc10h21+toluen	7.94E+11	0.0	16200.0
8200.	nc10h22+phch2=Cc10h21+toluen	7.94E+11	0.0	16200.0
8201.	nc10h22+phch2=Dc10h21+toluen	7.94E+11	0.0	16200.0
8202.	nc10h22+phch2=Ec10h21+toluen	7.94E+11	0.0	16200.0
8203.	c10h21qA+phch2=c10h21qjA+toluen	1.05E+11	0.0	9500.0
8204.	c10h21qB+phch2=c10h21qjB+toluen	1.05E+11	0.0	9500.0
8205.	c10h21qC+phch2=c10h21qjC+toluen	1.05E+11	0.0	9500.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

8206.	c10h21qD+phch2=c10h21qjD+toluen	1.05E+11	0.0	9500.0
8207.	c10h21qE+phch2=c10h21qjE+toluen	1.05E+11	0.0	9500.0
8208.	nc10h22+c6h5=Ac10h21+c6h6	7.94E+11	0.0	20500.0
8209.	nc10h22+c6h5=Bc10h21+c6h6	7.94E+11	0.0	16200.0
8210.	nc10h22+c6h5=Cc10h21+c6h6	7.94E+11	0.0	16200.0
8211.	nc10h22+c6h5=Dc10h21+c6h6	7.94E+11	0.0	16200.0
8212.	nc10h22+c6h5=Ec10h21+c6h6	7.94E+11	0.0	16200.0
8213.	pch+Ac10h21=pchA+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.00E+11	0.0	13700.0
8214.	pch+Ac10h21=pchB+nc10h22	1.21E+00	3.5	7472.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.00E+11	0.0	13700.0
8215.	pch+Ac10h21=pchC+nc10h22	1.21E+00	3.5	7472.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.00E+11	0.0	13700.0
8216.	pch+Ac10h21=pchD+nc10h22	6.01E-10	6.4	893.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.00E+11	0.0	13700.0
8217.	pch+Ac10h21=pchE+nc10h22	3.02E+00	3.5	5481.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.00E+11	0.0	13700.0
8218.	pch+Ac10h21=pchF+nc10h22	3.02E+00	3.5	5481.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.00E+11	0.0	13700.0
8219.	pch+Ac10h21=pchG+nc10h22	1.51E+00	3.5	5481.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.00E+11	0.0	13700.0
8220.	pch+Bc10h21=pchA+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8221.	pch+Bc10h21=pchB+nc10h22	1.21E+00	3.5	7472.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8222.	pch+Bc10h21=pchC+nc10h22	1.21E+00	3.5	7472.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8223.	pch+Bc10h21=pchD+nc10h22	6.01E-10	6.4	893.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8224.	pch+Bc10h21=pchE+nc10h22	3.02E+00	3.5	5481.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8225.	pch+Bc10h21=pchF+nc10h22	3.02E+00	3.5	5481.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8226.	pch+Bc10h21=pchG+nc10h22	1.51E+00	3.5	5481.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8227.	pch+Cc10h21=pchA+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8228.	pch+Cc10h21=pchB+nc10h22	1.21E+00	3.5	7472.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8229.	pch+Cc10h21=pchC+nc10h22	1.21E+00	3.5	7472.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8230.	pch+Cc10h21=pchD+nc10h22	6.01E-10	6.4	893.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8231.	pch+Cc10h21=pchE+nc10h22	3.02E+00	3.5	5481.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8232.	pch+Cc10h21=pchF+nc10h22	3.02E+00	3.5	5481.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8233.	pch+Cc10h21=pchG+nc10h22	1.51E+00	3.5	5481.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8234.	pch+Dc10h21=pchA+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8235.	pch+Dc10h21=pchB+nc10h22	1.21E+00	3.5	7472.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8236.	pch+Dc10h21=pchC+nc10h22	1.21E+00	3.5	7472.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8237.	pch+Dc10h21=pchD+nc10h22	6.01E-10	6.4	893.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8238.	pch+Dc10h21=pchE+nc10h22	3.02E+00	3.5	5481.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8239.	pch+Dc10h21=pchF+nc10h22	3.02E+00	3.5	5481.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8240.	pch+Dc10h21=pchG+nc10h22	1.51E+00	3.5	5481.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8241.	pch+Ec10h21=pchA+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8242.	pch+Ec10h21=pchB+nc10h22	1.21E+00	3.5	7472.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8243.	pch+Ec10h21=pchC+nc10h22	1.21E+00	3.5	7472.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8244.	pch+Ec10h21=pchD+nc10h22	6.01E-10	6.4	893.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8245.	pch+Ec10h21=pchE+nc10h22	3.02E+00	3.5	5481.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8246.	pch+Ec10h21=pchF+nc10h22	3.02E+00	3.5	5481.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8247.	pch+Ec10h21=pchG+nc10h22	1.51E+00	3.5	5481.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8248.	nc10h22+pchqjA=pchqA+Ac10h21	1.20E+13	0.0	20000.0
8249.	nc10h22+pchqjA=pchqA+Bc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8250.	nc10h22+pchqjA=pchqA+Cc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8251.	nc10h22+pchqjA=pchqA+Dc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8252.	nc10h22+pchqjA=pchqA+Ec10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8253.	nc10h22+pchqjB=pchqB+Ac10h21	1.20E+13	0.0	20000.0
8254.	nc10h22+pchqjB=pchqB+Bc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8255.	nc10h22+pchqjB=pchqB+Cc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8256.	nc10h22+pchqjB=pchqB+Dc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8257.	nc10h22+pchqjB=pchqB+Ec10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8258.	nc10h22+pchqjC=pchqC+Ac10h21	1.20E+13	0.0	20000.0
8259.	nc10h22+pchqjC=pchqC+Bc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8260.	nc10h22+pchqjC=pchqC+Cc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8261.	nc10h22+pchqjC=pchqC+Dc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8262.	nc10h22+pchqjC=pchqC+Ec10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8263.	nc10h22+pchqjD=pchqD+Ac10h21	1.20E+13	0.0	20000.0
8264.	nc10h22+pchqjD=pchqD+Bc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8265.	nc10h22+pchqjD=pchqD+Cc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8266.	nc10h22+pchqjD=pchqD+Dc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8267.	nc10h22+pchqjD=pchqD+Ec10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8268.	nc10h22+pchqjE=pchqE+Ac10h21	1.20E+13	0.0	20000.0
8269.	nc10h22+pchqjE=pchqE+Bc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8270.	nc10h22+pchqjE=pchqE+Cc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8271.	nc10h22+pchqjE=pchqE+Dc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8272.	nc10h22+pchqjE=pchqE+Ec10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8273.	nc10h22+pchqjF=pchqF+Ac10h21	1.20E+13	0.0	20000.0
8274.	nc10h22+pchqjF=pchqF+Bc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

8275.	nc10h22+pchqjF=pchqF+Cc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8276.	nc10h22+pchqjF=pchqF+Dc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8277.	nc10h22+pchqjF=pchqF+Ec10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8278.	nc10h22+pchqjG=pchqG+Ac10h21	1.20E+13	0.0	20000.0
8279.	nc10h22+pchqjG=pchqG+Bc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8280.	nc10h22+pchqjG=pchqG+Cc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8281.	nc10h22+pchqjG=pchqG+Dc10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8282.	nc10h22+pchqjG=pchqG+Ec10h21	6.00E+12	0.0	17500.0
8283.	pch+c10h21qjA=pchA+c10h21qA	6.00E+12	0.0	20000.0
8284.	pch+c10h21qjA=pchB+c10h21qA	6.00E+12	0.0	20000.0
8285.	pch+c10h21qjA=pchC+c10h21qA	6.00E+12	0.0	20000.0
8286.	pch+c10h21qjA=pchD+c10h21qA	3.61E+03	2.5	11532.0
8287.	pch+c10h21qjA=pchE+c10h21qA	1.93E+04	2.6	14910.0
8288.	pch+c10h21qjA=pchF+c10h21qA	1.93E+04	2.6	14910.0
8289.	pch+c10h21qjA=pchG+c10h21qA	9.64E+03	2.6	14910.0
8290.	pch+c10h21qjB=pchA+c10h21qB	6.00E+12	0.0	20000.0
8291.	pch+c10h21qjB=pchB+c10h21qB	6.00E+12	0.0	20000.0
8292.	pch+c10h21qjB=pchC+c10h21qB	6.00E+12	0.0	20000.0
8293.	pch+c10h21qjB=pchD+c10h21qB	3.61E+03	2.5	11532.0
8294.	pch+c10h21qjB=pchE+c10h21qB	1.93E+04	2.6	14910.0
8295.	pch+c10h21qjB=pchF+c10h21qB	1.93E+04	2.6	14910.0
8296.	pch+c10h21qjB=pchG+c10h21qB	9.64E+03	2.6	14910.0
8297.	pch+c10h21qjC=pchA+c10h21qC	6.00E+12	0.0	20000.0
8298.	pch+c10h21qjC=pchB+c10h21qC	6.00E+12	0.0	20000.0
8299.	pch+c10h21qjC=pchC+c10h21qC	6.00E+12	0.0	20000.0
8300.	pch+c10h21qjC=pchD+c10h21qC	3.61E+03	2.5	11532.0
8301.	pch+c10h21qjC=pchE+c10h21qC	1.93E+04	2.6	14910.0
8302.	pch+c10h21qjC=pchF+c10h21qC	1.93E+04	2.6	14910.0
8303.	pch+c10h21qjC=pchG+c10h21qC	9.64E+03	2.6	14910.0
8304.	pch+c10h21qjD=pchA+c10h21qD	6.00E+12	0.0	20000.0
8305.	pch+c10h21qjD=pchB+c10h21qD	6.00E+12	0.0	20000.0
8306.	pch+c10h21qjD=pchC+c10h21qD	6.00E+12	0.0	20000.0
8307.	pch+c10h21qjD=pchD+c10h21qD	3.61E+03	2.5	11532.0
8308.	pch+c10h21qjD=pchE+c10h21qD	1.93E+04	2.6	14910.0
8309.	pch+c10h21qjD=pchF+c10h21qD	1.93E+04	2.6	14910.0
8310.	pch+c10h21qjD=pchG+c10h21qD	9.64E+03	2.6	14910.0
8311.	pch+c10h21qjE=pchA+c10h21qE	6.00E+12	0.0	20000.0
8312.	pch+c10h21qjE=pchB+c10h21qE	6.00E+12	0.0	20000.0
8313.	pch+c10h21qjE=pchC+c10h21qE	6.00E+12	0.0	20000.0
8314.	pch+c10h21qjE=pchD+c10h21qE	3.61E+03	2.5	11532.0
8315.	pch+c10h21qjE=pchE+c10h21qE	1.93E+04	2.6	14910.0
8316.	pch+c10h21qjE=pchF+c10h21qE	1.93E+04	2.6	14910.0
8317.	pch+c10h21qjE=pchG+c10h21qE	9.64E+03	2.6	14910.0
8318.	pchqjA+Ac10h21=pchojA+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8319.	pchqjB+Ac10h21=pchojB+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8320.	pchqjC+Ac10h21=pchojC+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8321.	pchqjD+Ac10h21=pchojD+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8322.	pchqjE+Ac10h21=pchojE+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8323.	pchqjF+Ac10h21=pchojF+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8324.	pchqjG+Ac10h21=pchojG+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8325.	pchqjA+Bc10h21=pchojA+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8326.	pchqjB+Bc10h21=pchojB+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8327.	pchqjC+Bc10h21=pchojC+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8328.	pchqjD+Bc10h21=pchojD+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8329.	pchqjE+Bc10h21=pchojE+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8330.	pchqjF+Bc10h21=pchojF+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8331.	pchqjG+Bc10h21=pchojG+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8332.	pchqjA+Cc10h21=pchojA+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8333.	pchqjB+Cc10h21=pchojB+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8334.	pchqjC+Cc10h21=pchojC+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8335.	pchqjD+Cc10h21=pchojD+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8336.	pchqjE+Cc10h21=pchojE+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8337.	pchqjF+Cc10h21=pchojF+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8338.	pchqjG+Cc10h21=pchojG+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8339.	pchqjA+Dc10h21=pchojA+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8340.	pchqjB+Dc10h21=pchojB+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8341.	pchqjC+Dc10h21=pchojC+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8342.	pchqjD+Dc10h21=pchojD+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8343.	pchqjE+Dc10h21=pchojE+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8344.	pchqjF+Dc10h21=pchojF+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8345.	pchqjG+Dc10h21=pchojG+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8346.	pchqjA+Ec10h21=pchojA+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8347.	pchqjB+Ec10h21=pchojB+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8348.	pchqjC+Ec10h21=pchojC+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8349.	pchqjD+Ec10h21=pchojD+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8350.	pchqjE+Ec10h21=pchojE+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8351.	pchqjF+Ec10h21=pchojF+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8352.	pchqjG+Ec10h21=pchojG+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8353.	c10h21qjA+pchA=pchojA+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8354.	c10h21qjA+pchB=pchojB+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8355.	c10h21qjA+pchC=pchojC+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8356.	c10h21qjA+pchD=pchojD+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8357.	c10h21qjA+pchE=pchojE+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8358.	c10h21qjA+pchF=pchojF+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8359.	c10h21qjA+pchG=pchojG+c10h21ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8360.	c10h21qjB+pchA=pchojA+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8361.	c10h21qjB+pchB=pchojB+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8362.	c10h21qjB+pchC=pchojC+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8363.	c10h21qjB+pchD=pchojD+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8364.	c10h21qjB+pchE=pchojE+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8365.	c10h21qjB+pchF=pchojF+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8366.	c10h21qjB+pchG=pchojG+c10h21ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8367.	c10h21qjC+pchA=pchojA+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8368.	c10h21qjC+pchB=pchojB+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8369.	c10h21qjC+pchC=pchojC+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8370.	c10h21qjC+pchD=pchojD+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8371.	c10h21qjC+pchE=pchojE+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8372.	c10h21qjC+pchF=pchojF+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8373.	c10h21qjC+pchG=pchojG+c10h21ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8374.	c10h21qjD+pchA=pchojA+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8375.	c10h21qjD+pchB=pchojB+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8376.	c10h21qjD+pchC=pchojC+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8377.	c10h21qjD+pchD=pchojD+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8378.	c10h21qjD+pchE=pchojE+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

8379.	c10h21qjD+pchF=pchojF+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8380.	c10h21qjD+pchG=pchojG+c10h21ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8381.	c10h21qjE+pchA=pchojA+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8382.	c10h21qjE+pchB=pchojB+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8383.	c10h21qjE+pchC=pchojC+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8384.	c10h21qjE+pchD=pchojD+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8385.	c10h21qjE+pchE=pchojE+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8386.	c10h21qjE+pchF=pchojF+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8387.	c10h21qjE+pchG=pchojG+c10h21ojE	1.90E+12	0.0	-1200.0
8388.	c10h21qjA+pchqjA=pchojA+c10h21ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8389.	c10h21qjA+pchqjB=pchojB+c10h21ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8390.	c10h21qjA+pchqjC=pchojC+c10h21ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8391.	c10h21qjA+pchqjD=pchojD+c10h21ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8392.	c10h21qjA+pchqjE=pchojE+c10h21ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8393.	c10h21qjA+pchqjF=pchojF+c10h21ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8394.	c10h21qjA+pchqjG=pchojG+c10h21ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8395.	c10h21qjB+pchqjA=pchojA+c10h21ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8396.	c10h21qjB+pchqjB=pchojB+c10h21ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8397.	c10h21qjB+pchqjC=pchojC+c10h21ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8398.	c10h21qjB+pchqjD=pchojD+c10h21ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8399.	c10h21qjB+pchqjE=pchojE+c10h21ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8400.	c10h21qjB+pchqjF=pchojF+c10h21ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8401.	c10h21qjB+pchqjG=pchojG+c10h21ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8402.	c10h21qjC+pchqjA=pchojA+c10h21ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8403.	c10h21qjC+pchqjB=pchojB+c10h21ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8404.	c10h21qjC+pchqjC=pchojC+c10h21ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8405.	c10h21qjC+pchqjD=pchojD+c10h21ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8406.	c10h21qjC+pchqjE=pchojE+c10h21ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8407.	c10h21qjC+pchqjF=pchojF+c10h21ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8408.	c10h21qjC+pchqjG=pchojG+c10h21ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8409.	c10h21qjD+pchqjA=pchojA+c10h21ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8410.	c10h21qjD+pchqjB=pchojB+c10h21ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8411.	c10h21qjD+pchqjC=pchojC+c10h21ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8412.	c10h21qjD+pchqjD=pchojD+c10h21ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8413.	c10h21qjD+pchqjE=pchojE+c10h21ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8414.	c10h21qjD+pchqjF=pchojF+c10h21ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8415.	c10h21qjD+pchqjG=pchojG+c10h21ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8416.	c10h21qjE+pchqjA=pchojA+c10h21ojE+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8417.	c10h21qjE+pchqjB=pchojB+c10h21ojE+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8418.	c10h21qjE+pchqjC=pchojC+c10h21ojE+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8419.	c10h21qjE+pchqjD=pchojD+c10h21ojE+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8420.	c10h21qjE+pchqjE=pchojE+c10h21ojE+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8421.	c10h21qjE+pchqjF=pchojF+c10h21ojE+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8422.	c10h21qjE+pchqjG=pchojG+c10h21ojE+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8423.	mch+Ac10h21=mchA+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.00E+11	0.0	13700.0
8424.	mch+Bc10h21=mchA+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8425.	mch+Cc10h21=mchA+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8426.	mch+Dc10h21=mchA+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8427.	mch+Ec10h21=mchA+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8428.	ech+Ac10h21=echA+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.00E+11	0.0	13700.0
8429.	ech+Bc10h21=echA+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8430.	ech+Cc10h21=echA+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8431.	ech+Dc10h21=echA+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8432.	ech+Ec10h21=echA+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8433.	cyc6h12+Ac10h21=cyc6h11+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.00E+11	0.0	13700.0
8434.	cyc6h12+Bc10h21=cyc6h11+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8435.	cyc6h12+Cc10h21=cyc6h11+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8436.	cyc6h12+Dc10h21=cyc6h11+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8437.	cyc6h12+Ec10h21=cyc6h11+nc10h22	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8438.	cyc6h10+Ac10h21=cyc6h9+nc10h22	2.00E+11	0.0	7300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.00E+11	0.0	13700.0
8439.	cyc6h10+Bc10h21=cyc6h9+nc10h22	2.00E+11	0.0	7300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8440.	cyc6h10+Cc10h21=cyc6h9+nc10h22	2.00E+11	0.0	7300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8441.	cyc6h10+Dc10h21=cyc6h9+nc10h22	2.00E+11	0.0	7300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8442.	cyc6h10+Ec10h21=cyc6h9+nc10h22	2.00E+11	0.0	7300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+11	0.0	11400.0
8443.	phc4h9+pchA=Aphc4h8+pch	1.58E+11	0.0	12300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.52E-01	3.6	9141.0
8444.	phc4h9+pchA=Bphc4h8+pch	1.00E+11	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.52E-01	3.6	9141.0
8445.	phc4h9+pchA=Cphc4h8+pch	1.00E+11	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.52E-01	3.6	9141.0
8446.	phc4h9+pchA=Dphc4h8+pch	6.72E+10	0.0	7214.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.52E-01	3.6	9141.0
8447.	phc4h9+pchB=Aphc4h8+pch	1.58E+11	0.0	13300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.21E+00	3.5	7472.0
8448.	phc4h9+pchB=Bphc4h8+pch	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.21E+00	3.5	7472.0
8449.	phc4h9+pchB=Cphc4h8+pch	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.21E+00	3.5	7472.0
8450.	phc4h9+pchB=Dphc4h8+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.21E+00	3.5	7472.0
8451.	phc4h9+pchC=Aphc4h8+pch	1.58E+11	0.0	13300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.21E+00	3.5	7472.0
8452.	phc4h9+pchC=Bphc4h8+pch	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.21E+00	3.5	7472.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

8453.	phc4h9+pchC=Cphc4h8+pch	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.21E+00	3.5	7472.0
8454.	phc4h9+pchC=Dphc4h8+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.21E+00	3.5	7472.0
8455.	phc4h9+pchD=Aphc4h8+pch	1.58E+11	0.0	13300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.01E-10	6.4	893.0
8456.	phc4h9+pchD=Bphc4h8+pch	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.01E-10	6.4	893.0
8457.	phc4h9+pchD=Cphc4h8+pch	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.01E-10	6.4	893.0
8458.	phc4h9+pchD=Dphc4h8+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.01E-10	6.4	893.0
8459.	phc4h9+pchE=Aphc4h8+pch	1.58E+11	0.0	13300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.02E+00	3.5	5481.0
8460.	phc4h9+pchE=Bphc4h8+pch	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.02E+00	3.5	5481.0
8461.	phc4h9+pchE=Cphc4h8+pch	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.02E+00	3.5	5481.0
8462.	phc4h9+pchE=Dphc4h8+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.02E+00	3.5	5481.0
8463.	phc4h9+pchF=Aphc4h8+pch	1.58E+11	0.0	13300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.02E+00	3.5	5481.0
8464.	phc4h9+pchF=Bphc4h8+pch	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.02E+00	3.5	5481.0
8465.	phc4h9+pchF=Cphc4h8+pch	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.02E+00	3.5	5481.0
8466.	phc4h9+pchF=Dphc4h8+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.02E+00	3.5	5481.0
8467.	phc4h9+pchG=Aphc4h8+pch	1.58E+11	0.0	13300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.51E+00	3.5	5481.0
8468.	phc4h9+pchG=Bphc4h8+pch	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.51E+00	3.5	5481.0
8469.	phc4h9+pchG=Cphc4h8+pch	1.00E+11	0.0	11400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.51E+00	3.5	5481.0
8470.	phc4h9+pchG=Dphc4h8+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.51E+00	3.5	5481.0
8471.	phc4h9+pchqjA=Aphc4h8+pchqA	1.70E+13	0.0	20460.0
8472.	phc4h9+pchqjA=Bphc4h8+pchqA	1.12E+13	0.0	17700.0
8473.	phc4h9+pchqjA=Cphc4h8+pchqA	1.12E+13	0.0	17700.0
8474.	phc4h9+pchqjA=Dphc4h8+pchqA	2.66E+11	0.0	11269.0
8475.	phc4h9+pchqjB=Aphc4h8+pchqB	1.70E+13	0.0	20460.0
8476.	phc4h9+pchqjB=Bphc4h8+pchqB	1.12E+13	0.0	17700.0
8477.	phc4h9+pchqjB=Cphc4h8+pchqB	1.12E+13	0.0	17700.0
8478.	phc4h9+pchqjB=Dphc4h8+pchqB	2.66E+11	0.0	11269.0
8479.	phc4h9+pchqjC=Aphc4h8+pchqC	1.70E+13	0.0	20460.0
8480.	phc4h9+pchqjC=Bphc4h8+pchqC	1.12E+13	0.0	17700.0
8481.	phc4h9+pchqjC=Cphc4h8+pchqC	1.12E+13	0.0	17700.0
8482.	phc4h9+pchqjC=Dphc4h8+pchqC	2.66E+11	0.0	11269.0
8483.	phc4h9+pchqjD=Aphc4h8+pchqD	1.70E+13	0.0	20460.0
8484.	phc4h9+pchqjD=Bphc4h8+pchqD	1.12E+13	0.0	17700.0
8485.	phc4h9+pchqjD=Cphc4h8+pchqD	1.12E+13	0.0	17700.0
8486.	phc4h9+pchqjD=Dphc4h8+pchqD	2.66E+11	0.0	11269.0
8487.	phc4h9+pchqjE=Aphc4h8+pchqE	1.70E+13	0.0	20460.0
8488.	phc4h9+pchqjE=Bphc4h8+pchqE	1.12E+13	0.0	17700.0
8489.	phc4h9+pchqjE=Cphc4h8+pchqE	1.12E+13	0.0	17700.0
8490.	phc4h9+pchqjE=Dphc4h8+pchqE	2.66E+11	0.0	11269.0
8491.	phc4h9+pchqjF=Aphc4h8+pchqF	1.70E+13	0.0	20460.0
8492.	phc4h9+pchqjF=Bphc4h8+pchqF	1.12E+13	0.0	17700.0
8493.	phc4h9+pchqjF=Cphc4h8+pchqF	1.12E+13	0.0	17700.0
8494.	phc4h9+pchqjF=Dphc4h8+pchqF	2.66E+11	0.0	11269.0
8495.	phc4h9+pchqjG=Aphc4h8+pchqG	1.70E+13	0.0	20460.0
8496.	phc4h9+pchqjG=Bphc4h8+pchqG	1.12E+13	0.0	17700.0
8497.	phc4h9+pchqjG=Cphc4h8+pchqG	1.12E+13	0.0	17700.0
8498.	phc4h9+pchqjG=Dphc4h8+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
8499.	mch+Aphc4h8=mchA+phc4h9	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.58E+11	0.0	12300.0
8500.	mch+Bphc4h8=mchA+phc4h9	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	10400.0
8501.	mch+Cphc4h8=mchA+phc4h9	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	10400.0
8502.	mch+Dphc4h8=mchA+phc4h9	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.72E+10	0.0	7214.0
8503.	ech+Aphc4h8=echA+phc4h9	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.58E+11	0.0	12300.0
8504.	ech+Bphc4h8=echA+phc4h9	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	10400.0
8505.	ech+Cphc4h8=echA+phc4h9	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	10400.0
8506.	ech+Dphc4h8=echA+phc4h9	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.72E+10	0.0	7214.0
8507.	cyc6h12+Aphc4h8=cyc6h11+phc4h9	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.58E+11	0.0	13300.0
8508.	cyc6h12+Bphc4h8=cyc6h11+phc4h9	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	11400.0
8509.	cyc6h12+Cphc4h8=cyc6h11+phc4h9	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	11400.0
8510.	cyc6h12+Dphc4h8=cyc6h11+phc4h9	4.52E-01	3.6	9141.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.72E+10	0.0	8214.0
8511.	cyc6h10+Aphc4h8=cyc6h9+phc4h9	2.00E+11	0.0	7300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.58E+11	0.0	13300.0
8512.	cyc6h10+Bphc4h8=cyc6h9+phc4h9	2.00E+11	0.0	7300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	11400.0
8513.	cyc6h10+Cphc4h8=cyc6h9+phc4h9	2.00E+11	0.0	7300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	11400.0
8514.	cyc6h10+Dphc4h8=cyc6h9+phc4h9	2.00E+11	0.0	7300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.72E+10	0.0	8214.0
8515.	phc4h8qjA+pch=bbzqA+pchA	6.00E+12	0.0	20000.0
8516.	phc4h8qjA+pch=bbzqA+pchB	6.00E+12	0.0	20000.0
8517.	phc4h8qjA+pch=bbzqA+pchC	6.00E+12	0.0	20000.0
8518.	phc4h8qjA+pch=bbzqA+pchD	3.61E+03	2.5	11532.0
8519.	phc4h8qjA+pch=bbzqA+pchE	1.93E+04	2.6	14910.0
8520.	phc4h8qjA+pch=bbzqA+pchF	1.93E+04	2.6	14910.0
8521.	phc4h8qjA+pch=bbzqA+pchG	9.64E+03	2.6	14910.0
8522.	phc4h8qjB+pch=bbzqB+pchA	6.00E+12	0.0	20000.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

8523.	phc4h8qjB+pch=bbzqB+pchB	6.00E+12	0.0	20000.0
8524.	phc4h8qjB+pch=bbzqB+pchC	6.00E+12	0.0	20000.0
8525.	phc4h8qjB+pch=bbzqB+pchD	3.61E+03	2.5	11532.0
8526.	phc4h8qjB+pch=bbzqB+pchE	1.93E+04	2.6	14910.0
8527.	phc4h8qjB+pch=bbzqB+pchF	1.93E+04	2.6	14910.0
8528.	phc4h8qjB+pch=bbzqB+pchG	9.64E+03	2.6	14910.0
8529.	phc4h8qjC+pch=bbzqC+pchA	6.00E+12	0.0	20000.0
8530.	phc4h8qjC+pch=bbzqC+pchB	6.00E+12	0.0	20000.0
8531.	phc4h8qjC+pch=bbzqC+pchC	6.00E+12	0.0	20000.0
8532.	phc4h8qjC+pch=bbzqC+pchD	3.61E+03	2.5	11532.0
8533.	phc4h8qjC+pch=bbzqC+pchE	1.93E+04	2.6	14910.0
8534.	phc4h8qjC+pch=bbzqC+pchF	1.93E+04	2.6	14910.0
8535.	phc4h8qjC+pch=bbzqC+pchG	9.64E+03	2.6	14910.0
8536.	phc4h8qjD+pch=bbzqD+pchA	6.00E+12	0.0	20000.0
8537.	phc4h8qjD+pch=bbzqD+pchB	6.00E+12	0.0	20000.0
8538.	phc4h8qjD+pch=bbzqD+pchC	6.00E+12	0.0	20000.0
8539.	phc4h8qjD+pch=bbzqD+pchD	3.61E+03	2.5	11532.0
8540.	phc4h8qjD+pch=bbzqD+pchE	1.93E+04	2.6	14910.0
8541.	phc4h8qjD+pch=bbzqD+pchF	1.93E+04	2.6	14910.0
8542.	phc4h8qjD+pch=bbzqD+pchG	9.64E+03	2.6	14910.0
8543.	phc4h8qjA+pchA=pchojA+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8544.	phc4h8qjA+pchB=pchojB+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8545.	phc4h8qjA+pchC=pchojC+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8546.	phc4h8qjA+pchD=pchojD+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8547.	phc4h8qjA+pchE=pchojE+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8548.	phc4h8qjA+pchF=pchojF+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8549.	phc4h8qjA+pchG=pchojG+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8550.	phc4h8qjB+pchA=pchojA+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8551.	phc4h8qjB+pchB=pchojB+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8552.	phc4h8qjB+pchC=pchojC+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8553.	phc4h8qjB+pchD=pchojD+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8554.	phc4h8qjB+pchE=pchojE+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8555.	phc4h8qjB+pchF=pchojF+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8556.	phc4h8qjB+pchG=pchojG+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8557.	phc4h8qjC+pchA=pchojA+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8558.	phc4h8qjC+pchB=pchojB+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8559.	phc4h8qjC+pchC=pchojC+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8560.	phc4h8qjC+pchD=pchojD+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8561.	phc4h8qjC+pchE=pchojE+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8562.	phc4h8qjC+pchF=pchojF+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8563.	phc4h8qjC+pchG=pchojG+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8564.	phc4h8qjD+pchA=pchojA+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8565.	phc4h8qjD+pchB=pchojB+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8566.	phc4h8qjD+pchC=pchojC+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8567.	phc4h8qjD+pchD=pchojD+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8568.	phc4h8qjD+pchE=pchojE+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8569.	phc4h8qjD+pchF=pchojF+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8570.	phc4h8qjD+pchG=pchojG+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8571.	pchqjA+Aphc4h8=pchojA+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8572.	pchqjA+Bphc4h8=pchojA+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8573.	pchqjA+Cphc4h8=pchojA+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8574.	pchqjA+Dphc4h8=pchojA+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8575.	pchqjB+Aphc4h8=pchojB+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8576.	pchqjB+Bphc4h8=pchojB+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8577.	pchqjB+Cphc4h8=pchojB+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8578.	pchqjB+Dphc4h8=pchojB+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8579.	pchqjC+Aphc4h8=pchojC+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8580.	pchqjC+Bphc4h8=pchojC+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8581.	pchqjC+Cphc4h8=pchojC+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8582.	pchqjC+Dphc4h8=pchojC+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8583.	pchqjD+Aphc4h8=pchojD+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8584.	pchqjD+Bphc4h8=pchojD+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8585.	pchqjD+Cphc4h8=pchojD+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8586.	pchqjD+Dphc4h8=pchojD+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8587.	pchqjE+Aphc4h8=pchojE+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8588.	pchqjE+Bphc4h8=pchojE+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8589.	pchqjE+Cphc4h8=pchojE+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8590.	pchqjE+Dphc4h8=pchojE+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8591.	pchqjF+Aphc4h8=pchojF+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8592.	pchqjF+Bphc4h8=pchojF+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8593.	pchqjF+Cphc4h8=pchojF+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8594.	pchqjF+Dphc4h8=pchojF+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8595.	pchqjG+Aphc4h8=pchojG+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
8596.	pchqjG+Bphc4h8=pchojG+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
8597.	pchqjG+Cphc4h8=pchojG+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
8598.	pchqjG+Dphc4h8=pchojG+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
8599.	pchqjA+phc4h8qjA=pchojA+phc4h8ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8600.	pchqjA+phc4h8qjB=pchojA+phc4h8ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8601.	pchqjA+phc4h8qjC=pchojA+phc4h8ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8602.	pchqjA+phc4h8qjD=pchojA+phc4h8ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8603.	pchqjB+phc4h8qjA=pchojB+phc4h8ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8604.	pchqjB+phc4h8qjB=pchojB+phc4h8ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8605.	pchqjB+phc4h8qjC=pchojB+phc4h8ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8606.	pchqjB+phc4h8qjD=pchojB+phc4h8ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8607.	pchqjC+phc4h8qjA=pchojC+phc4h8ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8608.	pchqjC+phc4h8qjB=pchojC+phc4h8ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8609.	pchqjC+phc4h8qjC=pchojC+phc4h8ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8610.	pchqjC+phc4h8qjD=pchojC+phc4h8ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8611.	pchqjD+phc4h8qjA=pchojD+phc4h8ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8612.	pchqjD+phc4h8qjB=pchojD+phc4h8ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8613.	pchqjD+phc4h8qjC=pchojD+phc4h8ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8614.	pchqjD+phc4h8qjD=pchojD+phc4h8ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8615.	pchqjE+phc4h8qjA=pchojE+phc4h8ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8616.	pchqjE+phc4h8qjB=pchojE+phc4h8ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8617.	pchqjE+phc4h8qjC=pchojE+phc4h8ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8618.	pchqjE+phc4h8qjD=pchojE+phc4h8ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8619.	pchqjF+phc4h8qjA=pchojF+phc4h8ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8620.	pchqjF+phc4h8qjB=pchojF+phc4h8ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8621.	pchqjF+phc4h8qjC=pchojF+phc4h8ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8622.	pchqjF+phc4h8qjD=pchojF+phc4h8ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8623.	pchqjG+phc4h8qjA=pchojG+phc4h8ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8624.	pchqjG+phc4h8qjB=pchojG+phc4h8ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8625.	pchqjG+phc4h8qjC=pchojG+phc4h8ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8626.	pchqjG+phc4h8qjD=pchojG+phc4h8ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0

© 2009 Tous droits réservés.
http://doc.univ-lille1.fr

Résumé

Le nécessaire respect des normes anti-pollution oblige à développer de nouvelles technologies moteurs plus propres et plus sobres. Cependant la mise au point de ces technologies nécessite une connaissance précise des mécanismes d'oxydation des carburants pétroliers usuels. L'objectif de cette thèse est donc d'élaborer un mécanisme détaillé d'oxydation d'un gazole. Celui-ci est composé de plusieurs milliers de molécules qui ne peuvent toutes être étudiées individuellement. Trois hydrocarbures, représentant chacun une des familles constitutives de ce carburant, ont été choisis : le n-décane pour les paraffines, le n-propylcyclohexane pour les naphtènes et le n-butylbenzène pour les composés aromatiques. L'oxydation de ces hydrocarbures et de leurs mélanges binaires et ternaire a été étudiée en réacteur auto-agité à haute pression (10 bar) et dans un large domaine de températures (550-1150 K) et de richesses (0,25-1,50). Les profils de concentration des réactifs, produits et principaux intermédiaires stables ont été obtenus par prélèvement puis analyse par chromatographie en phase gazeuse (GC-FID-TCD-MS). Un modèle cinétique détaillé d'oxydation de basse et haute température a ensuite été développé pour ces 3 hydrocarbures et leurs mélanges, puis validé par confrontation avec les résultats expérimentaux. Les analyses cinétiques ont permis de dégager les principales voies de dégradation de ces hydrocarbures (mécanisme de peroxydation-isomérisation à basse température et de décomposition par β–scission au-delà) et d'identifier les réactions les plus influentes (réactions impliquant les composés possédant de 0 à 2 atomes de carbone) sur la cinétique d'oxydation des hydrocarbures initiaux.

Mots clés: carburants diesel, polluants, réacteur auto-agité, combustion, cinétique, mélanges, modélisation, mécanisme cinétique détaillé

Summary

To respect the new requirements on exhaust pollutants emissions, it is necessary to develop cleaner and more efficient engines. However the technical development of such engines needs a good knowledge of the oxidation process of common oil fuels. The aim of this work is to build a detailed chemical kinetic reaction mechanism for the combustion of a diesel fuel. A Diesel fuel is a complex mixture of thousands of compounds that cannot be studied individually. Therefore three surrogate fuels were chosen to represent the dominant chemical classes in a Diesel fuel: n-decane for paraffins, n-propylcyclohexane for cycloalkanes and n-butylbenzene for aromatics. The oxidation of these compounds and that of the binary and ternary blends were studied in a Jet-Stirred Reactor at high-pressure (10 bar), over the temperature range 550-1150 K, for different equivalence ratios (0.25-1.50). Concentration profiles of reactants, products and main stable intermediates were obtained by probe sampling and GC-FID-TCD-MS analyses. Then a low- and high-temperature oxidation detailed kinetic mechanism for the 3 selected hydrocarbons and their mixtures was developed and validated against the experimental data of the present work. The kinetic analyses allowed (i) to delineate the main oxidation pathways (peroxidation-isomerisation at low temperature and beyond beta–scission decomposition) (ii) to identify the most sensitive reactions (C0–C2 subset) for the oxidation rate of the fuels.

Keywords: diesel fuel, pollutants, jet stirred reactor, combustion, kinetics, mixtures, modelling, detailed kinetic mechanism

---

Laboratoire de Physico-Chimie des Processus de Combustion et de l'Atmosphère (PC2A)
Université des Sciences et Technologies de Lille Bâtiment C11 - 59655 Villeneuve d'Ascq Cedex

Institut de Combustion, Aérothermique, Réactivité et Environnement (ICARE)
1C, avenue de la Recherche Scientifique 45071 - Orléans Cedex 2

© 2009 Tous droits réservés. http://doc.univ-lille1.fr